

✓ 307.226

34
1986

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

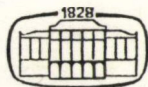
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXIV. KÖTET

1. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1986

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korxzerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratszünetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet
1444 Budapest VIII., Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 120 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 388), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

GÁZ- ÉS FÉMGŐZLÉZEREK CÉLJÁRA ALKALMAZOTT ÜREGES KATÓDÚ KISÜLÉSEK*

RÓZSA KÁROLY

MTA KFKI Szilárdtestfizikai Kutató Intézet

TARTALOM

Bevezetés	1
1. Üreges katódú lézerek	4
1.1. A ködfénykisülés jelensége a katód közelében	4
1.2. A ködfénykisülés mechanizmusa	6
1.3. Az üreges katódú kisülés	9
1.4. Lézerek üreges katódú kisülésben	14
1.4.1. Alapvető lézer konstrukciók	14
1.4.2. Nemesgáz elegyet tartalmazó üreges katódú lézerek	17
1.4.3. Könnyen elpárologtatható anyagot tartalmazó üreges katódú lézerek	18
1.4.4. Katódporlásos üreges katódú lézerek	20
1.4.5. Illékony fémvegyületet tartalmazó üreges katódú lézerek	21
2. Nagyáramú üreges katódú lézerek	21
2.1. Élvedett üreges katódú kisülési cső	21
2.2. Élvedett üreges katódú lézer	23
2.3. Üreges katódú lézer osztott kisüléssel	28
3. Szabályozható feszültségű üreges katódú kisülések és lézerek	36
3.1. A „HAC” kisülés	36
3.2. Lézerek „HAC kisülésben”	46
3.2.1. Nemesgáz elegyet tartalmazó lézerek	46
3.2.2. Vizsgálatok katódporlasztásos fémgőz lézereken „HAC” kisülésben	50
3.2.3. Párologtatásos HAC lézerek	51
Összefoglalás	54
Köszönetnyilvánítás	55
Irodalom	56

BEVEZETÉS

Az első gázlézer (1961) infravörös fényt sugárzott, milliwatt körüli teljesítménnyel. Az azóta eltelt idő alatt a lézerek teljesítőképessége egyre nőtt. A fejlesztő-kutató munka nagyrészt a hullámhossztartomány kiterjesztésére, a teljesítmény növelésére és jobb hatásfokú lézerek előállítására irányult. Ezt a célt szolgálják a technológiai kutatások, a lézerek gerjesztési mechanizmusának vizsgálatai és a kisülésben lejátszódó elemi folyamatok tanulmányozása. A lézerkutatásoknak újszerű feladatokat kell megoldani a gázkisülések területén is. Felvetődik az igény a hagyományos gázkisülési elrendezések lézercélokra történő továbbfejlesztésére, olyan kisülések létrehozására, ahol a gerjesztő folyamatok hatásosabban használhatók ki. Jelen dolgozat ehhez a területhez kíván hozzájárulni.

* Érkezett 1984. febr. 1. Kandidátusi értekezés.

A lézer kisülési csövében gerjesztett részecskéket kell lehetőleg nagy koncentrációban létrehozni. Ezért a látható és ultraibolya fényt sugárzó gázlézerek gerjesztésében igen fontos szerepe van a kisülés nagyenergiájú elektronjainak. A térfogategységben időegység alatt keletkező gerjesztett részecskék száma elektrongerjesztés esetén az

$$R = N_a \cdot n_e \langle \sigma(E) v \rangle$$

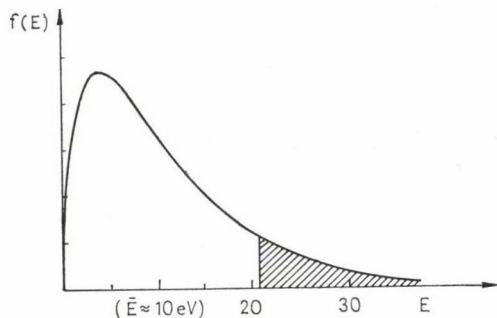
kifejezéssel adható meg, ahol N_a az alapállapotú részecskék sűrűsége, n_e az elektronok sűrűsége, $\sigma(E)$ az illető gerjesztett állapotnak az elektrongerjesztési hatáskeresztmetszete, v az atomok és elektronok relatív sebessége. A $\sigma(E)$ hatáskeresztmetszet erősen energiafüggő. A lassú elektronok energiája nem elegendő a magasan fekvő gerjesztett állapotok elérésére. Általánosságban elmondhatjuk, hogy látható és ultraibolya fényt sugárzó lézerek gerjesztéséhez (gerjesztési mechanizmustól függetlenül) olyan elektronok szükségesek, amelyeknek energiája meghaladja a 18–20 eV-ot.

Egymásnak többszörösen ellentmondó feladat a lézer gázkisülési csövében nagy gáznyomás és nagy elektronsűrűség mellett az elektronok energiájának növelése. Ehhez járul hozzá a viszonylag nagy térfogatú homogén kisülés igénye is. (A kicsatolt lézerteljesítmény a gerjesztett atomok számával arányos, ez a térfogat növelésével nő.) A dolgozat tulajdonképpen végig ehhez a feladathoz kapcsolódik. A problémát az első és legelterjedtebb gázlézereken, a He—Ne lézereken kívánom bemutatni.

A He—Ne lézer gerjesztése a kisülés pozitív oszlopú szakaszában jön létre. Az elektronok energiaeloszlása közelítően Maxwell-eloszlást követ, az elektronhőmérséklet növekszik, ha a gáz nyomását, vagy a kisülési erő átmérőjét csökkentjük. A lézerműködést létrehozó folyamat alapállapotú neon atomok reakciója metastabil He atomokkal. A metastabil He atomok elsősorban elektronütközéssel jönnek létre.

A He—Ne lézer teljesítményének adott kisülési cső átmérő mellett a gáznyomás függvényében maximuma van. Ennél az értéknél a kisülés elektronjainak energia szerinti eloszlását az 1. ábra mutatja [1].

Láthatjuk, hogy még optimális működés esetén is, a lézer gerjesztéséhez az elektronoknak csak igen kis hányada hasznosítható. Ha az elektronok energiáját a gáz-



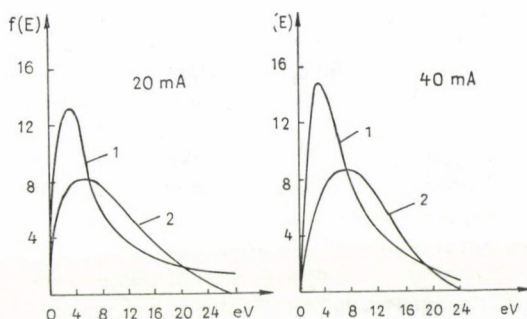
1. ábra. Elektronok energiaeloszlása pozitív oszlopú He—Ne kisülésben, a lézerteljesítmény szempontjából optimális gáznyomáson. A bevonalkázott rész jelenti azt a tartományt, ahol az elektronok energiája elegendő a metastabil He atomok gerjesztéséhez

nyomás csökkentésével kívánjuk emelni, a lézerműködésben résztvevő atomok számának csökkenése miatt csökken a lézerteljesítmény. Ha a kisülési cső átmérőjét csökkentjük, a lecsökkent térfogat csökkenti a lézer teljesítményét. Hasonló problémák jelentkeznek — gerjesztési mechanizmustól függetlenül — a többi folytonos gázlézernél is.

Igen nagy áramnál, több lépéses gerjesztésnél, valamivel kisebb elektronenergiák is elegendőek lézerműködés létrehozására (pl. Ar ion lézer). A nagy áram azonban különleges technológiát igényel (BeO vagy wolfram kapilláris, különleges katód), ami az ilyen lézerek árában (15—25 000 \$) is kifejezésre jut.

Ha ultraibolya átmeneteket kívánunk gerjesztetni, a fenti problémák fokozottabban jelentkeznek. A gerjesztéshez ekkor még nagyobb energiájú elektronok szükségesek, a pozitív oszlopú kisülésben azonban, lézercélokra még megfelelő gáznymáson, az elektronok energiája tovább nem növelhető. A pozitív oszlopú lézerekben elért legrövidebb hullámhosszú lézerátmenet a Cd-ion 325 nm színeképvonala.

A folytonos lézerek hullámhossztartományának további kiterjesztése a növekvő frekvenciák irányába az ún. üreges katódú lézerek segítségével vált lehetővé. Itt a katód közelében kialakuló ún. „negatív fényt” hasznosítjuk a lézerátmenetek gerjesztésére. Az üreges katódú kisülésben az elektronok energiaszétlását összehasonlítva a pozitív oszlopú kisülésben mért eloszlással (2. ábra), láthatjuk, hogy a nagyenergiájú elektronok részaránya a katódüregben nagyobb [2].



2. ábra. Az elektronok energiaszétlása pozitív oszlopú He kisülésben [1] és hasonló átmérőjű katódüregben [2]
 $p = 0,9$ torr, átmérő = 2 cm

A kisülés nagyenergiájú elektronjait a katód közelében levő nagy térerősség hozza létre. A katód felületénél \sim mm nagyságú szakaszon 300—600 V feszültség esik, az ún. katódosítás. Ez a feszültség közel egyenlő a kisülés teljes feszültségével.

Ennek a feszültségnek növelése javítaná az üreges katódú lézerek teljesítőképességét, a nagyobb égési feszültség növelné a nagyenergiájú elektronok részarányát és energiáját. Mivel a kisülésben a gyors elektronok sűrűsége igen kicsi, az elektronok energia eloszlásának még kismértékű, kedvező irányú megváltoztatásától is jelentős eredményeket várhatnánk. Az égési feszültség azonban adott nyomáson alig függ a kisülési áramtól, a nyomás csökkentésével az égési feszültség növelhető, de ekkor csökken a lézerműködést létrehozó atomok száma.

Célszerű lenne a kisülés áramának növelése is, ez ugyanis az elektronok sűrűségét növelné. Az áram növelésének azonban az ívkisülés kialakulása szab határt. A kiterjedt, homogén üreges katódú kisülés konstrukciótól függően 1—5 A áramig stabil, a lézerek optimális árama általában ennél az értéknél nagyobb lenne.

A dolgozatban azokat a kísérleti vizsgálatokat foglaltam össze, amelyek lehetővé tették, hogy az üreges katódú lézerek a hagyományos konstrukcióhoz képest lényegesen szélesebb feszültség- és áramtartományban működjenek.

Az első fejezet az üreges katódú lézerek irodalmának bemutatása mellett a gáz-kisülések fizikájának azon részeit tartalmazza, amelyeket a dolgozatban felhasználtam. A következő két fejezet a dolgozat érdemi része.

A második fejezet tartalmazza a nagyáramú üreges katódú lézereken végzett méréseket. Kimértem, hogy üreges katódú kisülésben milyen áramnál megy át a ködfénykisülés ívkisülésbe a gáznyomás és a katódhossz függvényében különböző gázokban. Sikerült kimutatni, hogy létezik egy viszonylag éles ívelési kritikus áramtartomány, amely széles határok között független a katód hosszától. Az ívelési kritikus áramnál kisebb áramértéknél a kisülés teljesen ívmentes. A jelenség kvalitatív értelmezése alapján rögzíteni lehetett olyan konstrukciós elveket, amelyek alkalmazásával épített lézerek sokkal nagyobb árammal voltak terhelhetők, mint az előző lézerkonstrukciók. Ilyen lézerben folytonos lézerműködést fedeztünk fel hélium argon elegyben az Ar ion 476,5 nm színekponton.

A harmadik fejezet egy olyan új típusú üreges katódú kisülést ír le, ahol — tudomásunk szerint először — lehetőség nyílt a kisülés égési feszültségének szabályozására, függetlenül a katódüreg átmérőjétől, a gáznyomástól és a kisülés áramától. Várakozásunknak megfelelően a kisülés színekpének vizsgálata azt mutatta, hogy az égési feszültség növelésével általában nő a teljes színekp intenzitása, és ez a növekedés az ionok színekp vonalain különösen szembejövő. Az így nyert színekpeket a hagyományos üreges katódú kisülésben kapott színekpekkel összehasonlítva várható volt, hogy a nagyfeszültségű üreges katódú lézerek teljesítménye nagyobb lesz az eddigi üreges katódú lézerekben elért teljesítménynél.

A harmadik fejezet a nagyfeszültségű üreges katódú lézerek építését és a rajtuk végzett méréseket is tartalmazza. Nemesgáz elegyben a lézerek küszöbárama kb. negyedére csökkent, és az elérhető lézerteljesítmény is megnövekedett. A hatásosabb gerjesztést mutatja, hogy ezekben a lézerekben további új lézerátmeneteket (XeII: 486,3 és 531,4 nm, KrII: 431,8, 438,7, 458,3, 512,6 és 651,0 nm, ArII: 648,3 és 686,1 nm) fedeztünk fel. Elsőként hoztunk létre He—Ar elegyben üreges katódú kisülésben lézerműködést az Ar ion 454,5 és 457,9 nm színekp vonalain. Igen alacsony áramküszöböt találtunk a katódporlásos (He—Cu, Ne—Al) és a párologtatós (He—I, He—Cd) üreges katódú lézerekénél is.

1. ÜREGES KATÓDÚ LÉZEREK

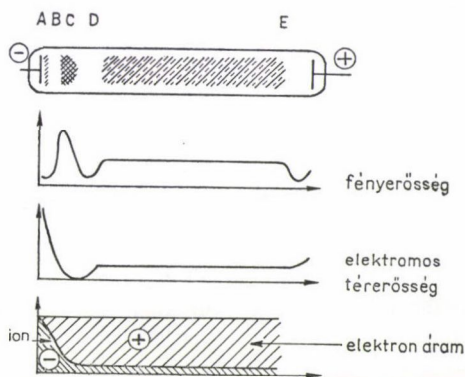
1.1. A ködfénykisülés jelensége a katód közelében

Légritkított gázban elhelyezett elektródákra kapcsolt feszültség hatására a gázon keresztül áram folyik. Ez az áram 10^{-18} és több száz amper között változhat, természetesen közben a gázkisülés tulajdonságai is nagymértékben változnak. Jelen dolgozatban olyan hidegkatódos kisüléseket vizsgálunk, ahol a katód felületi áramsűrű-

sége $0,02\text{--}1\text{ A/cm}^2$, a gáznyomás $0,05\text{--}5\text{ kPa}$ ($0,4\text{--}45\text{ Torr}$). Ekkor a katód környékén eső $300\text{--}600\text{ V}$ feszültség hatására kiterjedt önfenntartó gázkisülés alakul ki (ködfénykisülés).

Kis áramsűrűségnél a katód felületének csak egy részéről indul kisülés, az áram a feszültség növekedése nélkül emelhető, miközben az árammal arányos egyre nagyobb katódfelület vesz részt a kisülésben. Miután a kisülés a katód teljes felületét beborította, az áram növelése a katód felületén az áramsűrűség növekedését jelenti, ekkor a feszültség is növekszik. Ebben a tartományban (abnormális ködfénykisülés) működnek az üreges katódú lézerek. Az áram további növekedésekor ívkisülés alakul ki. A kisülés a katód felületén összehúzóódik és egy igen kis ($\sim 10^{-3}\text{ cm}$) átmérőjű ún. katódfoltból indul ki. A kisülés fenntartásához szükséges feszültség a ködfénykisülés égési feszültségének kb. tizedére csökken. Ez a jelenség súlyos problémát jelent az üreges katódú lézerek kutatásában és általában a kisülési cső károsodását eredményezi.

A ködfénykisülés tartományában a kisülés különböző világos és sötét szakaszokból tevődik össze. A néhány torr nyomású gázkisülés leglényegesebb részeit a 3. ábrán láthatjuk [3].



3. ábra. A kisülés különböző szakaszai ködfénykisülésnél

A katódtól az anód felé haladva találhatunk $1\text{--}2$ világító réteget (a gáz anyagi minőségétől és nyomásától függően), amit egy nagyobb méretű sötétebb tér követ ($A\text{--}B$). Ezután következik a negatív fény ($B\text{--}C$) tartománya. A kisülési cső anódját ettől kezdve bárhová tehetjük, a kisülés az $A\text{--}C$ szakaszban nem változik meg. Ha a negatív fény és az anód között nagyobb távolság van, az anódnál és a negatív fény után kialakul egy rövid sötétebb szakasz, a többi részt egyenletesen tölti ki egy fényes tartomány, a pozitív oszlop ($D\text{--}E$). A gáznyomásnak vagy az elektromos paramétereknek változtatásával a kisülés képe is változik, néha kisebb nyomáson az egész kisülés világos és sötét szakaszokra tagozódhat.

Az üreges katódú lézerek kisülési csövében általában csak a katód sötét tér és negatív fény van jelen, az anód többnyire a negatív fényhez közel helyezkedik el. Vizsgálataink is csupán a kisülés ezen részére szorítkoznak. A katód sötét tér és a negatív fény mérete a gáznyomástól függ.

Ha egy 3. ábra szerinti kisülésben a nyomást csökkentjük, a sötét tér és a negatív fény mérete nő a pozitív oszlop rovására. Eljuthatunk egy olyan nyomásig, ahol az

elektródák közötti távolságot a katód sötét tér és a negatív fény teljesen kitölti. Ha a nyomást tovább csökkentjük, a kisülés kialszik, illetve csak sokkal nagyobb feszültség hatására tartható fenn („gátolt” kisülés, „obstructed discharge”).

Hasonló jelenség játszódik le, ha állandó nyomáson az elektródák távolságát csökkentjük; fokozatosan elfogy a pozitív oszlop, majd eljutunk egy olyan kisüléshez, amikor az elektródák közötti térben csak a katód sötét térnek és a negatív fénynek jut hely. Az elektródák közötti távolság további csökkentésével előáll a gátolt kisülés.

Ez a jelenség igen fontos az üreges katódú lézerek tervezésében. Nemkívánatos kisülés létrejöttét tudjuk megakadályozni két elektróda között a rájuk kapcsolt jelentős feszültség ellenére is, ha a gáznyomás és az elektródák közötti távolság szorzata kisebb egy adott értéknél.

Ugyanezt a jelenséget fogjuk felhasználni a harmadik fejezetben, ahol olyan üreges katódú kisüléseket fogunk tanulmányozni, ahol az égési feszültség és ezzel együtt az elektródák távolsága szabályozható.

A 3. ábrán nyomon követhetjük az elektromos térerősség változását is a cső mentén. A katód felületéhez közel az elektromos térerősség igen nagy. A kisülés létrehozásához szükséges feszültség legnagyobb része (ha a kisülési cső nem túl szűk vagy hosszú) erre a szakaszra jut. A katód sötét térben a térerősség lecsökken a katód felületén levő kb. 1000 V/cm értékről közel nullára. A negatív fényben a térerősség igen kicsi. Az elektromos áram legnagyobb részét a katód közelében az ionok a kisülés többi részében az elektronok mozgása adja meg.

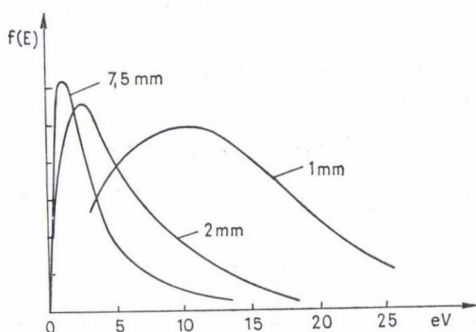
1.2. A ködfénykisülés mechanizmusa

A kisülésben tapasztalt néhány száz voltos égési feszültség természetesen nem elegendő ahhoz, hogy olyan térerősséget hozzon létre a katód közelében, hogy az elektronok közvetlenül az elektromos térerősség hatására lépjenek ki a katód felületéből. A kisülés beindulásában a kozmikus sugárzás hatására létrejövő töltéshordozó pároknak jelentős szerepe van. Ezek az elektródákra kapcsolt feszültség hatására szétválnak, ionizálnak, a katódba becsapódó ionok elektronokat váltanak ki a katód felületéből. A jelenség lavinaszerűen folytatódik. Az elektródákra kapcsolt feszültség lecsökken, a gáz vezetővé válik és néhány μ s alatt kialakul az önfenntartó gázkisülés. Ekkor a katód felületéből kilépő néhány elektronvolt energiával rendelkező elektronok gyorsulnak a sötét térben levő nagy térerősség hatására. Rugalmasan ütköznek gázatomokkal és energiájuk fokozatosan nő. Amikor elérik azt az energiát, ami a gázatomok gerjesztéséhez szükséges, megjelenik az első fényes réteg. (A katód és az első fényes réteg közötti szakasz valóban sötét, a többi „sötét” terek csak a fényes részekhez viszonyítva sötétek.) A tovább gyorsuló elektronok ionizálnak, újabb elektronokat hoznak létre, energiájuk nagy részét elvesztik, majd a keletkezett másodlagos elektronokkal együtt gyorsulnak tovább. A gyorsuló elektronok ionizálnak és gerjesztenek, mialatt az elektromos térerősség fokozatosan csökken. Ahogy a katód sötét térből átjutnak a negatív fény tartományába, a nagyszámú elektrongerjesztés hatására a kisülés egyre fényesebb lesz.

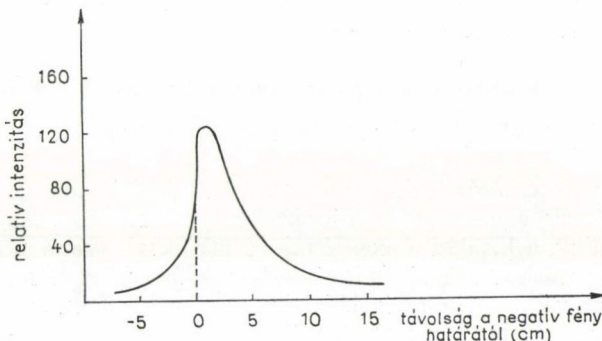
A negatív fényben az elektromos térerősség elhanyagolható, az elektronok a gázatomok gerjesztése és ionizációja közben az energiájukat fokozatosan elvesztik. A negatív fény tartományából intenzív fénysugárzás lép ki, különösen az ultraibolya sugárzás jelentős.

Az elektronok energiaeloszlását a negatív fényben a lézerműködés körülményeinek megfelelő nyomás- és áramértékek mellett *Gill* vizsgálta kísérletileg [4]. A 4. ábra mutatja, hogyan csökken az elektronok energiája a katódtól mért távolság függvényében. Hasonló csökkenést tapasztalunk akkor is, ha a gáznyomást növeljük és a negatív fény egy adott pontjában vizsgáljuk az elektronok energiaeloszlását.

Az elektronok energiájának ezt a csökkenését a kisülésben az ultraibolya színképvonalak intenzitásának csökkenése is szépen mutatja (5. ábra).



4. ábra. Az elektronok energiaeloszlása 2 kPa nyomású héliumban a katódtól mért távolság függvényében (áramsűrűség $4,5 \text{ mA/cm}^2$)



5. ábra. A He 388,6 nm színképvonalának intenzitása a negatív fény határától mért távolság függvényében

A negatív fény tartományának elhagyása után az elektromos térerősség gyakorlatilag nullára csökken, az elektronok mozgása már majdnem teljesen rendezetlen. (Az önfenntartáshoz szükséges folyamatok már lejátszódtak.) Az üreges katódú lézerekben általában ide kerül a kisülési cső anódja. Ha a negatív fény és az anód között nagyobb távolság van, ezt túlnyomórészt a pozitív oszlop tölti ki. Itt a plazma semleges, az elektronok energiája Maxwell-eloszlást mutat, gyenge ionizáció pótolja a töltéshordozó veszteségeket.

A katód sötét térnek és a negatív fénynek fontos szerepe van a kisülés önfenntartásának szempontjából. A katód felületére az ionok és nagyenergiájú semleges részek főleg a sötét térből, az ultraibolya fotonok főleg a negatív fényből érkeznek és ezek váltják ki az ún. elsődleges elektronokat. Az önfenntartó kisüléshez az szükséges, hogy az ilyen módon kiváltott elektronok hatására lejátszódó folyamatokban keletkezett az elektronok kiváltásához szükséges ionok, nagyenergiájú részecskék és ultraibolya fény elérjék a katód falát.

Ha a katód falára érkező minden ionra γ_i , ultraibolya fotonra γ_p , nagyenergiájú semleges részecskére γ_s elektron lép ki a katódból, és az ütközések eredményeképpen a kilépett elektronok M -szerese távozik a sötét térből, valamint egy kilépő elektron átlagosan K , a katód falára érkező ultraibolya fotont és L semleges részecskét hoz létre, az önfenntartás feltétele:

$$\gamma_i(M-1) + \gamma_p K + \gamma_s L = 1.$$

Az önfenntartás feltételéből érthetővé válik a gázkisülés reagálása a nyomás és az elektródák távolságának változtatására. A nyomás növelésével az elektronok rövidebb szakasz befutása után képesek a szükséges számú ionizációt létrehozni, majd energiájukat is rövidebb szakaszon veszti el. A sötét tér és a negatív fény mérete csökken, fordítottan arányos a gáz nyomásával. A sötét tér hosszára a nyomás függvényében egy

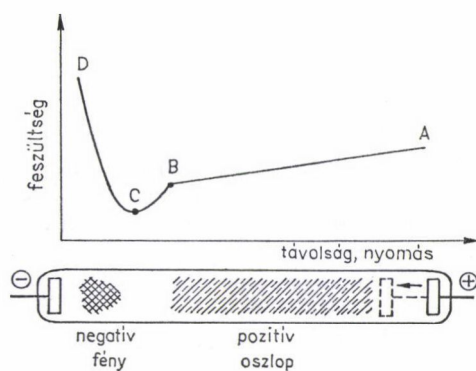
$$p \cdot d = \text{const.}$$

összefüggést írhatunk fel, ahol p a gáz nyomása és d a sötét tér hossza. Hasonló kifejezés írható fel a negatív fény szakaszának nyomásfüggésére is. A $p \cdot d = \text{const.}$ összefüggést, ahol d valamilyen távolság jellegű mennyiség számos egyéb jelenség nyomásfüggésére is alkalmazhatjuk. Mivel az ütközési szabad úthossz a nyomással fordítottan arányos a $d = \frac{1}{p} \text{const.}$ összefüggés azt a távolságot jelzi, amelyen a p változtatásával (ha egyéb paraméterek nem változnak) azonos számú ütközés jön létre.

A nyomás csökkentésével eljuthatunk egy olyan értékig, ahol a teljes elektródák közötti térre szükség van a megfelelő ionizáció létrehozásához. Ha a nyomást még tovább csökkentjük, a kisülési térben létrejövő ütközések száma annyira lecsökken, hogy az önfenntartáshoz szükséges ionizáció csak úgy jöhet létre, ha az ionizáció valószínűségét növeljük (gátolt kisülés). Az adott áram fenntartásához szükséges égési feszültség növekszik, a nagyobb feszültség hatására növekszik a nagyenergiájú elektronok száma és az elektronok energiája, az elektronok energiájának növekedésével (kb. 100 eV-ig) növekszik az ionizáció valószínűsége. A gátolt kisülés tartományába eljuthatunk úgy is, ha adott nyomáson az elektródák távolságát csökkentjük. A gátolt kisülés egy adott pd értéknél jön létre, értéke héliumban $pd \approx 1 \text{ kPa} \cdot \text{mm}$.

Az égési feszültség függését az elektródák távolságától a 6. ábrán láthatjuk. A feszültség minimuma jelzi az önfenntartó ködfénykisüléshez szükséges legrövidebb távolságot (illetve a legkisebb pd értéket, ahol még az égési feszültség növelése nélkül is fenntartható a kisülés).

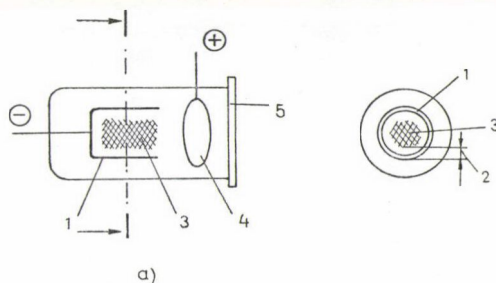
Az $A-B$ szakaszon a csökkenő feszültséget a pozitív oszlop hosszának csökkenése adja. A $B-C$ szakaszon eltűnik a negatív fény és a pozitív oszlop közötti sötét tér, a $C-D$ szakasz a gátolt kisülés tartománya.



6. ábra. A ködfénykisülés égési feszültsége az elektródák távolságának függvényében. (Rögzített katód mellett az anódot közelítjük a katódhoz)

1.3. Az üreges katódú kisülés

Az üreges katódú kisülést hasznosító lámpákat több mint 60 éve használják spektroszkópiai célokra. Megfelelően méretezett hengeres katód belsejében intenzív és effektív kisülést lehet létrehozni, ahol a negatív fény intenzitását a speciális katódgeometria tovább növeli. Legyen a katód egy hengeres cső, válasszuk meg úgy a gáznyomást, hogy a cső belső átmérője legyen egyenlő a katód sötét tér hosszának kétszerese és a negatív fény hosszának összegével. Ha egy ilyen katódot tartalmazó kisülési csőben gázkisülést hozunk létre, a katód belsejében fényes, ún. üreges katódú kisülés alakul ki. A gyors elektronokat ez a geometria a katódüreg közepébe fókuszálja, az elektronok egy része eljut a szembenálló katód tasztító terébe és oszcilláló jellegű mozgást végeznek. Ezt az oszcillációt zavarja a viszonylag magas gáznyomás, de a gerjesztés hatásfoka növekszik [5].



7. ábra. Üreges katódú lámpa (a) és az üreges katód keresztmetszete. 1 — katód, 2 — katód sötét tér, 3 — a kisülés fényes része (negatív fény), 4 — anód, 5 — ablak

Az üreges katódú lámpa és a katód keresztmetszete a 7. ábrán látható. (Jellemző adatok egy ilyen üreges katódú lámpára: katódhossz 1—2 cm, katódüreg átmérő 0,5—1 cm, gáznyomás 0,05 kPa, áram 50—10 mA.)

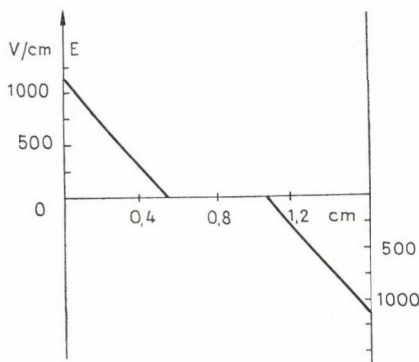
Az üreges katódú kisülésben a negatív fény a katódüreg közepére koncentrálódik. Amíg sík vagy domború katódnál a katódfelület minden egyes részéhez hozzátartozik a negatív fény egy része, üreges katódnál egy közös negatív fény tartozik a teljes katódfelülethez, még a szembenálló katódfelületekhez is, a kisülés határfoka megnövekszik. Sík katódnál az ionok és ultraibolya fotonok nagy része az önfenntartás szempontjából elvész a negatív fény határán. Üreges katódú kisülésben ezek a részecskék elérik a katódfelületet és elsődleges elektronokat váltanak ki. Adott áramú kisüléshez így alacsonyabb égési feszültség tartozik, illetve adott égési feszültségnél az üreges katódú kisülés árama nagyobb (üreges katódú effektus) mint sík katódú kisülésnél.

Az elektronok energiaeloszlását üreges katódú kisülésben *C. Popovici* és *munkatársai* mérték és összehasonlították a sík katódnál kialakuló negatív fényben mért adatokkal. Megállapították, hogy a gyors elektronok részaránya katódüregben többszöröse a sík katódnál talált értéknek [6].

A pozitív oszlopú kisülés és az üreges katódú kisülés elektronjainak energia szerinti eloszlását *Borodin* és *Kagan* [2] vizsgálták. Méréseik szerint az üreges katódú kisülésben a nagyenergiájú elektronok sűrűsége lényegesen nagyobb, ugyanakkor a 0—4 eV tartományba eső elektronok sűrűsége is nagyobb a pozitív oszlopban talált értéknél, az eloszlás erősen eltér a pozitív oszlopban talált (2. ábrán bemutatott) Maxwell jellegű eloszlástól.

Az elektromos térerősséget *Little* és *von Engel* [7] mérték. Két sík katód között létrehozott kisülésben elektronsugár eltérítéssel határozták meg a térerősséget, mérési eredményeiket a 8. ábra mutatja.

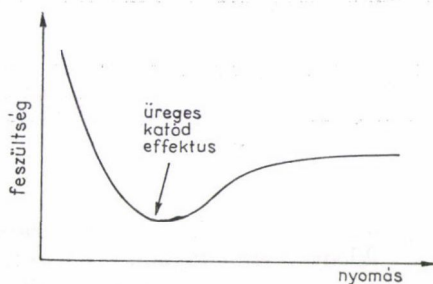
A 8. ábrán jól látszik, hogy a térerősség a katód felületénél jelentős, de a negatív fény tartományában már nincs számottevő tér.



8. ábra. Elektromos térerősség üreges katódú kisülés belsejében. (0,3 torr N_2 , katód-távolság 1,6 cm, katódésés 376 V, áramsűrűség $6 \cdot 10^{-3}$ A/cm². A mérést 10,8 kV energiájú elektronsugárral végezték)

Az üreges katódú kisülés elmélete is *Little és von Engel* nevéhez fűződik [7]. Kimutatták, hogy a katódgeometria hatása miatt alacsonyabb az üreges katódú kisülés égési feszültsége a sík katódú kisülésben talált értéknél. Számításba vették a negatív fényből kilépő sugárzást és a sötét térben keletkező ionokat. Az elsődleges elektronok kiváltásában, számításaik szerint, a fotoeffektus szerepe megnövekszik. Az önfenntartó kisülés létrehozásához így kevesebb ion, következésképpen alacsonyabb égési feszültség szükséges. Az égési feszültség csökkenése az üreges katódú kisülés kialakulásakor számításaikban jól egyezik a gyakorlattal. *Fujii* [8] a negatív fényből kilépő ionáramot is figyelembe vette, de számításainak végeredménye nem tér el lényegesen az előző elmélettől. *Helm, Howorka és Pahl* [9] elméletében az elektromos térerősség eloszlása is jól egyezik a gyakorlattal.

Az üreges katódú effektus kialakulását a kisülés égési feszültségének nyomásfüggésén követhetjük nyomon (9. ábra).

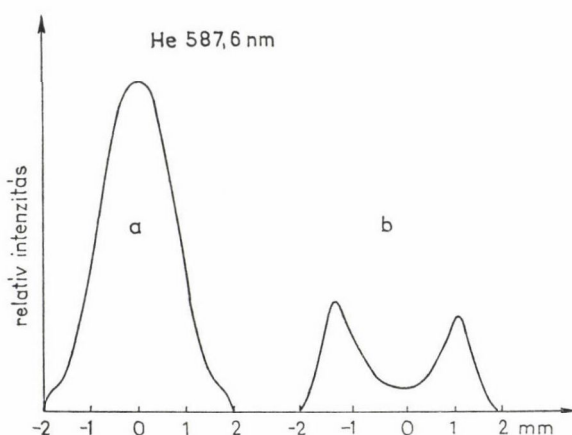


9. ábra. Az üreges katódú kisülés égési feszültségének nyomásfüggése

Nagy nyomáson a negatív fény és a katód sötét tér hossza sokkal kisebb, mint a katódüreg átmérője. A negatív fény egy fényes gyűrű a katód mentén, a katódüreg közepe sötétebb. A kisülés lényegében egy sík katódú kisülésnek felel meg. Csökkenő nyomással (ahogy a katód sötét tér és a negatív fény hossza növekszik) az üreg térfogatának egyre nagyobb részét tölti ki a negatív fény, a kisülés hatásfoka növekszik és a feszültség csökken egy minimumig. Ekkor már a kisülés a katódüreg közepén a legfényesebb. A nyomás további csökkentésével az égési feszültség növekszik, és a kisülés fényes része egyre kisebb területre korlátozódik a katódüreg közepén.

A kisülés eloszlása a katódüreg átmérőjétől is hasonlóan függ. Mivel a sötét tér és a negatív fény hossza fordítottan arányos a gáznyomással, az üreges katódú effektus egy adott $a \cdot p$ értéknél következik be (a a katódüreg átmérője, p a gáznyomás). Az $a \cdot p$ értéke természetesen csak addig a határig csökkenthető, amíg az önfenntartás szempontjából lényeges folyamatok a katódüreg belsejében le tudnak játszódni. (Az $a \cdot p$ csökkentésére előbb a feszültség növekszik, majd a kisülés diffúzzá válik és fokozatosan kitölti a kisülés rendelkezésére álló teljes térfogatot a katódüregtől függetlenül.) A legkisebb nyomás, ahol az üreges katódú kisülés még fenntartható, kb. 30%-kal kisebb mint az a nyomás, ahol a sík katódnál mért sötét tér és negatív fény hossza megegyezik a katódüreg átmérőjével [10].

A kisülés színképvonalainak intenzitását a katódtól mért távolság függvényében *Rózsa* [11, 12], *Kill* [13], *Fujii* [14] és *Kuen, Störi és Howorka* [15] vizsgálták. A 10.



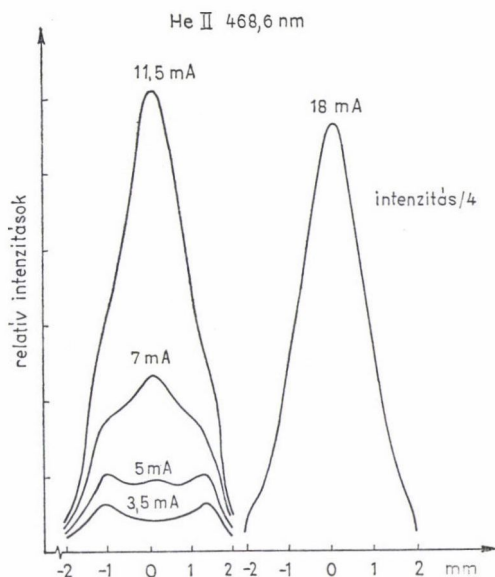
10. ábra. A hélium 587,6 nm színekvonalának radiális intenzitáseloszlása kis és nagy nyomáson. Katódüreg hossza 30 mm, átmérője 4 mm, gáznyomás: 0,32 kPa (a), ill. 2,3 kPa (b)

ábrán láthatjuk a He 587,6 nm színekvonalának radiális eloszlását az üreges katódú kisülésnek megfelelő és annál lényegesen nagyobb nyomáson.

A kisülés ion és elektronsűrűségének térbeli eloszlását *Howorka* [16] vizsgálta és a színekvonal-intenzitások eloszlásához hasonló függést talált.

Az üreges katódú kisülés — az említett tulajdonságai miatt — igen vonzóan tűnt folytonos gázlézerek gerjesztésére. 1969 óta, amikor *Karabut és munkatársai* [17], majd *Sugawara és Tokiwa* [18], illetve *Schuebel* [19] a He—Cd ion lézeren megmutatták, hogy ez a kisülés valóban jól alkalmazható ion lézerek gerjesztésére, az üreges katódú lézerek a folytonos gázlézer kutatás középpontjába kerültek. A lézerteljesítmény vizsgálata a kisülés paramétereinek függvényében azt mutatta, hogy a hagyományos üreges katódú lámpáétól lényegesen eltérő körülmények között lehet megfelelő lézerműködést elérni. A gáznyomás sokkal nagyobb (0,5—5 kPa) a katód felületi áramsűrűség 0,1—1 A/cm², egy üreges katódú lézer jellemző aktív szakasza 0,3—2 m. Ez a kisülés nagymértékben különbözik az eddig ismert üreges katódú kisüléstől (összehasonlításképpen egy üreges katódú lámpa adatai: gáznyomás ~0,1 kPa, katód felületi áramsűrűség 1—20 mA/cm², katód aktív hossza 0,5—1 cm). A nagy nyomás miatt a katód sötét tér és a katódosítás igen rövid szakaszra korlátozódik. Ez a szakasz gyorsítja a kisülés elektronjait a nagy nyomású, gyakorlatilag elektromos erőtermentes fényes részbe. *Gill* [4] mérései szerint a nagy nyomás ellenére a gyors elektronok még jelentős koncentrációban vannak jelen a kisülésben. Mivel a negatív fény hossza növekvő árammal kismértékben növekszik, várható, hogy egy, a 10b. ábrán ábrázolt intenzitáseloszlás az áram növelésével átmegy egy olyan típusú intenzitáseloszlásba, amit a 10a. ábrán láthatunk.

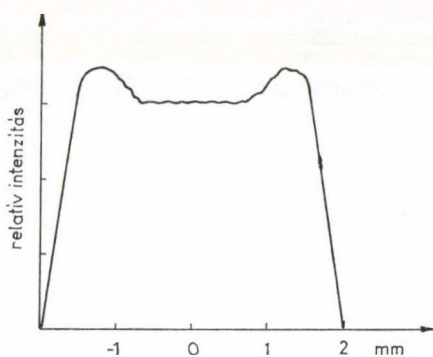
A 11. ábrán a He ion 468,6 nm színekvonala intenzitáseloszlásának változását láthatjuk 4 mm átmérőjű katódüregben az áram növelésének hatására [12]. Az ábráról látható, hogyan alakul ki növekvő árammal egy nagy intenzitású, 9a. ábrának



11. ábra. A He ion 468,6 nm színekpvoná-
lának intenzitásváltozása 4 mm átmérőjű
30 mm hosszú katódüregben az áram növe-
lésének hatására. Gáznyomás 2,3 kPa

megfelelő intenzitáseloszlás olyan $a \cdot p$ értéknél, ami sokkal nagyobb, mint az üreges katódú effektushoz tartozó érték.

A nagyáramú üreges katódú kisülésben jelentős problémát jelent az ívkisülésbe történő átmenet, nagy áramoknál a kődfénykisülés stabilitása csökken. Ezzel a problémával a következő fejezetben foglalkozunk. Az üreges katódú effektushoz tartozó



12. ábra. 4 mm átmérőjű katódüregben an CII
324,7 nm színekpvonálának intenzitáseloszlása
(gáz: 13 Pa Kr₂+1,5 kPa He, katód felületi
áramsűrűség 54 mA/cm²)

$a \cdot p$ érték az áram növelésének hatására növekszik, ugyanakkor az égési feszültség csökkenése a sík katódhoz képest kevésbé szembetűnő [20].

A vizsgálatoknál zavaró körülmény a gáz magas hőmérséklete. 1 cm^3 gáztér-fogatra 50—1000 W (!) folyamatos elektromos teljesítmény jut.

A katód falának ütköző nagyenergiájú részecskék hatására a katód falából nagy mennyiségű fémgőz jut a kisülésbe (katódporlás). Lehetőség van olyan fématomok és ionok gerjesztésére, ahol a fém gőzállapotban tartásához egyébként igen magas hőmérsékletre lenne szükség (pl. Cu, Al). Vízűtött rézkatódú kisülési csőben a réz 324,7 nm ultraibolya színképvonalának intenzitáseloszlását láthatjuk a katódüreg keresztmetszete mentén a 12. ábrán [11].

Az üreges katódú kisülés nemcsak fényforrásként használható. Újabban igen hasznos eszköznek bizonyult mint ionforrás ionok, negatív ionok és többszörösen ionizált atomok előállítására is [21—25].

1.4. Lézerek üreges katódú kisülésben

Az üreges katódú He—Cd lézer [17—19] (1969) felfedezése óta a legkülönbözőbb elemek ionszínképén sikerült lézerműködést üreges katódú kisülésben létrehozni. A kutatás tovább folytatódik a megfelelő konstrukció kidolgozására is. A lézerekben kPa körüli nyomású nemesgáz és Pa körüli nyomású aktív anyag elegyében hozunk létre nagyáramú üreges katódú kisülést. Az aktív anyagokat célszerű gőznyomásuk alapján csoportosítani, mivel a lézer konstrukciója nagymértékben függ attól, hogy milyen hőmérséklet szükséges az aktív anyag megfelelő gőznyomásának biztosításához. Ezen az alapon az aktív anyagokat négy csoportba oszthatjuk:

- nemesgázok (Ne, Ar, Kr, Xe);
- fémek könnyen párolgó vegyületei (fémhaloidok);
- könnyebben elpárologtatható elemek (Cd, Zn, Hg, As, Se, I stb.);
- fémek alacsony gőznyomással (Cu, Ag, Au, Al, Pb stb.).

1.4.1. Alapvető lézerkonstrukciók

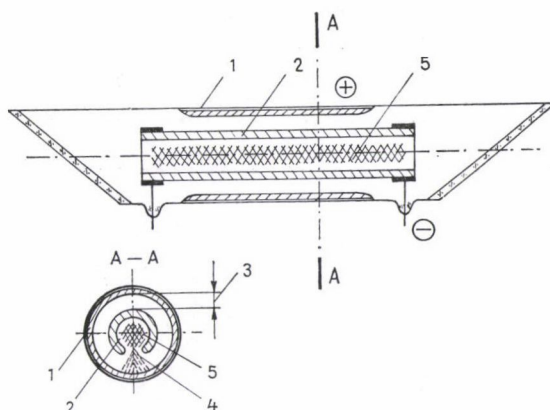
A nemesgázelegyet tartalmazó lézerek a legegyszerűbbek, mivel itt nincs szükség az egyenletes gőznyomás biztosítására a kisülési cső mentén és a lézer ablakait sem kell védeni a rácsapódó fémgőztől.

Könnyebben párologtatható anyagok gőznyomását a kisülési cső hőmérsékletével lehet szabályozni. A csövet lehet fűteni a kisülés saját hőjével, esetenként külön fűtést is használnak.

A nehezen párolgó fémek gőzeit tartalmazó lézereknél általános módszer a katódporlasztás. Általában a kisülési cső katódját a megfelelő fémből készítik, amikor az illető fém túl drága, a katódüreg belsejét vonják be a megfelelő fémmel.

A nagyszámú lézerkonstrukció két alapvető csoportba sorolható: keresztirányú és (részben) hosszirányú kisülést alkalmazó lézerek. A 13. ábra Schuebel keresztirányú kisülést tartalmazó lézerét mutatja [19].

A kisülési csövet két koncentrikus cső alkotja. A külső cső a kisülés anódja, ami a kisülési cső falát is képezi. A katód fel van hasítva és a kisülés — a 13. ábrán vázolt



13. ábra. Üreges katódú lézer keresztirányú kisüléssel.
1 — anód, 2 — katód, 3 — távolság a két elektróda között, ahol kisülés nem jön létre, 4 — felhasítás, 5 — az üreges katódú kisülés tartománya

módon — csak keresztirányban folyik („slotted” hollow cathode laser). A két elektróda között — a felhasítás kivételével — nem folyik áram, a két elektróda közötti távolság (3 a 13. ábrán) úgy van megválasztva, hogy az adott gáznomás mellett az itt létrejövő gátolt kisülés égési feszültsége sokkal nagyobb lenne, mint az üreges katódú kisüléshez szükséges feszültség, így itt kisülés nem is alakulhat ki.

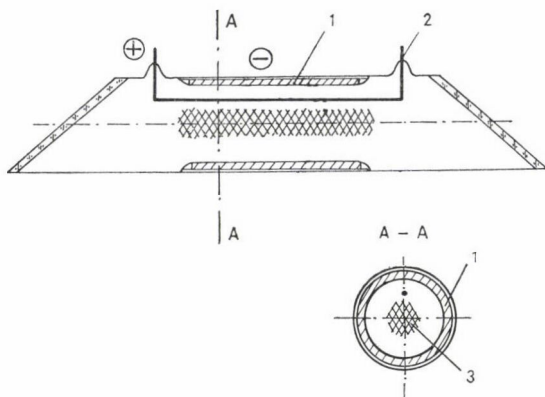
Schuebel üreges katódú lézere kétségtől szellemes és igen egyszerű konstrukció. (Ebben a berendezésben a Cd ion eddig ismert két lézervonalán kívül további hat új lézérátmenetet fedeztek fel.) A kisülési cső azonban csak szűk nyomástartományban működik kielégítően (a katód sötét tér nagysága nyomásfüggő), és csak viszonylag alacsony áramértékekig stabil. A lézer optimális áramát az ívkisülés kialakulása miatt nem lehetett elérni.

A kisülési cső falát képezheti a katód is. A 14. ábrán látható megoldásban az anód egy vékony drót a katód fala mellett (*Karabut* [17]). Ha az anód a katód sötét térbe kerül, a negatív fény teljes keresztmetszete használható a lézerműködés létrehozására. A katód hűtése és esetenkénti fűtése is egyszerűen megoldható, nagyáramú stabilitása azonban nem jobb a felhasított üreges katódú lézer stabilitásánál.

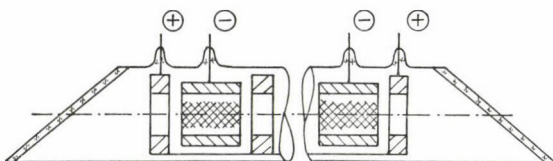
A 13. és 14. ábrán látható megoldásoknak, ahol az elektróda (vagy elektródák) képezik a kisülési cső falát, egyszerűségük mellett további előnyük, hogy az elektromos csatlakozásokat nem kell a vákuumtérbe bevezetni. Ezek a csatlakozások komplikálják a kisülési csövet és gyakran nemkívánatos kisülések kiindulópontjait képezik.

A keresztirányú kisülések előnye az egyenletes kisülés a cső hossza mentén. Ha a komponensek nyomása nem változik a katódüreg mentén, az elektronsűrűség és az elektronok energiaeloszlása is állandó, mivel hosszirányban nem folyik áram és katód felületén az áramsűrűség állandó, ha az áram elég nagy.

A kisülés stabilitása növelhető a hosszirányú kisüléseket hasznosító lézerek alkalmazásával, itt a cső mentén több elektromos bevezetést helyeznek el az egyenletes árameloszlás biztosítása érdekében. Ilyen lézer látható a 15. ábrán (*Sugawara* [10]).



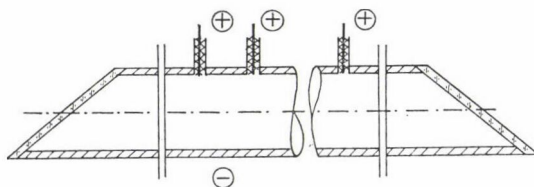
14. ábra. Üreges katódú lézer kisülési csőve keresztirányú kisüléssel és belső anódja.
1. katód, 2. anód, 3. üreges katódú kisülés



15. ábra. Katód- és anódszegmenseket tartalmazó üreges katódú lézer kisülési csőve

A katód- és anódszegmenseknek független elektromos bevezetésük van, így külső ellenállások segítségével megoldható, hogy az egyes elektródák az áram azonos legyen. A katódszegmenseken belül azonban az elektronok sűrűsége és energiaeoszlása is függvénye az anódtól mért távolságnak. A katód felületi áramsűrűsége szintén helyfüggő és egy bizonyos távolság után (mivel a nagyobb távolság leküzdéséhez nagyobb feszültség szükséges) nyilvánvalóan csökken. Ezért a katód hossza általában nem nagyobb a katódüreg átmérőjének 5–6-szorosánál.

A kisülést gyakran úgy próbálják egyenletessé tenni, hogy több anód segítségével osztják el a kisülést egy hosszabb katód mentén („flute type” hollow cathode laser [26–28]). A hengeres katód falába egy sor lyukat fúrnak, és ezekben helyezkednek el



16. ábra. „Furulya típusú” üreges katódú lézer

az anódok. Ilyen „furulya típusú” lézer kisülési csövének vázlatát láthatjuk a 16. ábrán (*Piper és Webb* [26]).

Az ilyen módon összeépített elektródákat gyakran üveg vagy kvarc köpenyben helyezik el és a katód felületét szigetelőanyaggal védik a nemkívánatos kisüléstől.

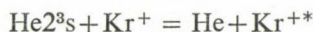
1.4.2. Nemesgázelegyet tartalmazó üreges katódú lézerek

A nemesgázelegyet tartalmazó nagy feszültségű, ill. nagyáramú üreges katódú lézereken elért eredmények a 2., ill. 3. fejezet jelentős részét képezik.

He—Kr elegyben impulzus üzemi pozitív oszlopú kisülésben *Dana és Laures* [29] észlelt lézerműködést, a részletes vizsgálatokat *Jánossy M.* végezte el [30]. Lézerműködést a Kr ion 431,7, 458,2 és 469,4 nm vonalain talált, melyek közül az utóbbi volt a legerősebb. A lézer optimumát 5,8 kPa He és 2,6 Pa Kr elegyében találta, a lézerimpulzus maximuma kb. 10 μ s-t késett a gerjesztő impulzushoz képest. Ez a késés jellegzetessége azoknak az átmeneteknek, amelyek gerjesztésében ionok, ill. metastabil atomok játszószék a főszerepet, ezek kialakulása hasonlóan késik a gerjesztő impulzushoz képest.

Ezek az átmenetek általában pozitív oszlopú kisülésben csak impulzusüzemben, míg üreges katódú kisülésben folytonos üzemben is lehet lézerműködést létrehozni. A jelenség oka, hogy üreges katódú kisülésben folytonos üzemben is elérhető a nagyenergiájú elektronok olyan sűrűsége, ami a lézerműködés elindításához elégséges. A nagyenergiájú elektronok részarányának további növelése várhatóan növelné ezen lézerek teljesítőképességét.

A He—Kr lézer felső nívójának szelektív gerjesztése metastabil He atomok és Kr ionok reakcióján alapul:



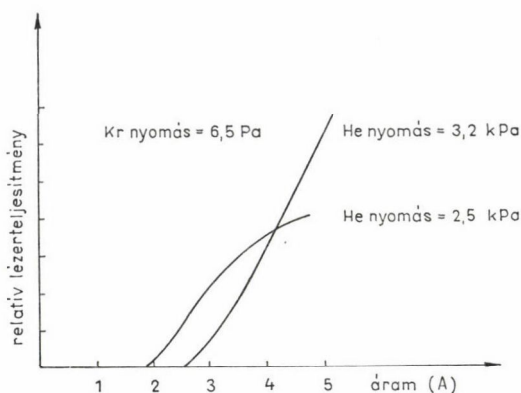
A kripton ionizációja túlnyomórészt szintén metastabil atomokkal, Penning típusú ionizáció révén megy végbe.

Egyéb nemesgáz elegyek is mutattak hasonló viselkedést. *Goto, Nakamura és Hattori* [31], majd *Jánossy M., Csillag L., Rózsa K. és Salamon T.* [32] vizsgálatai He—Ar gázelegyben hasonló viselkedést találtak az Ar-ion 476,5 nm színeképvonalán. *Dana és Laures* [29] kimutatták, hogy hasonló mechanizmussal történik Ne—Xe elegyben az Xe-ion 531,4 és 486,3 nm színeképvonalának gerjesztése.

Jánossy M., Csillag L., Rózsa K. és Salamon T. üreges katódú kisülésben folytonos lézerműködést észleltek a He—Kr elegyben a Kr-ion 469,4 nm színeképvonalán [33]. 5 A gerjesztő áram mellett az optimális gáznyomás 3,2 kPa He és 6,5 Pa Kr volt. A lézerteljesítmény függését a kisülési áramtól a 17. ábrán láthatjuk.

A 17. ábráról látható, hogy a lézerteljesítmény vizsgálata nagyobb áramoknál igen érdekes lett volna, ezt azonban az ívkisülés kialakulása nem tette lehetővé. A maximális lézerteljesítmény 1% áteresztésű nyitótükörrel ~ 5 mW volt.

A He—Kr elegyen kívül megvizsgáltuk a He—Ar és Ne—Xe gázelegyet is, ezekben azonban akkor nem sikerült lézerműködést létrehozni, feltehetően kisebb erősítésük miatt. A kisülés áramának és égési feszültségének növelése később lehetővé tette ezekben a gázelegyekben is a folytonos lézerműködés létrehozását (2.3. fejj.).



17. ábra. A He—Kr ion lézer teljesítménye a kisülési áram függvényében

Az üreges katódú He—Kr lézer gyakorlati szempontból is fontos lehet. Olcsó, egyszerű, folyamatos kék fényt sugárzó gázlézer jelenleg még nem kapható kereskedelemben. A pozitív oszlopban működő argon ion lézer széles körű alkalmazását elsősorban a lézer magas ára korlátozza.

Konstruktív szempontból ez a lézer a legegyszerűbb, elhagyhatók a kisülési csőnek a fémgőz létrehozásához szükséges részei. Ha a végős cél üreges katódú fémgőz lézer építése, a lézert akkor is célszerű előbb He—Kr kisülésben kipróbálni. Komoly gond ma még a megfelelő lézerkonstrukció kialakítása és a megfelelő nyomású fémgőz létrehozása egyenletes eloszlásban a kisülési csőben. A két problémát a He—Kr elegy használatával külön lehet választani.

1.4.3. Könnyen elpárologtatható anyagokat alkalmazó üreges katódú lézerek

Ebbe a csoportba tartoznak az első és ma is legnépszerűbb üreges katódú lézerek. A megfelelő, 0,1 kPa nagyságú gőznyomás itt olyan hőfokon érhető el, ahol a lézerek szokásos szerkezeti anyagai (üveg, kvarc, kerámia, fém-kerámia kötések stb.) még használhatóak. Ebbe a csoportba tartoznak: He—Cd [10], [17—19], [34—36], He—Zn [10], [13], [17], [36—38], He—I [39, 40], He—Hg [41], He—As [42], Ne—Tl [43]. Az egyes lézerek legjellemzőbb vonalai:

CdII	441,6 nm,	533,8 nm,	537,8 nm	
ZnII	491,2 nm,	492,4 nm,	747,9 nm,	758,8 nm,
I II	504,7 nm,	576,1 nm,	612,8 nm,	773,5 nm, 880,4 nm
HgII	615,0 nm,	794,5 nm		
AsII	538,5 nm,	539,7 nm,	651,1 nm	
TlII	594,9 nm			

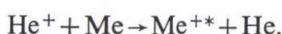
A lézervonalak gerjesztési mechanizmusa elsősorban Penning ionizáció, vagy töltéscserélő ütközés [10], [13], [36], [44—47], az alábbi sémák szerint:

Penning ionizáció:



(He^M a metastabil állapotú He atom)

Töltéscsicszerelő ütközés:



A töltéscsicszerelő ütközés rezonáns folyamat, a Penning ionizációnál a ΔE energia felesleget a távozó elektron viszi el.

A lézerek építésénél külön figyelmet kell szentelni a fémgőznek. Ha fémgőz csapódik le a kisülési cső falán, megköti a töltő gázt. A lecsapódott fémgőz rövidzárlatot is okozhat a két elektroda között. A kisülési cső leghidegebb részei általában a Brewster ablakok, az ezekre lecsapódott fémgőz legkisebb mennyisége is jelentősen csökkenti a lézer teljesítményét.

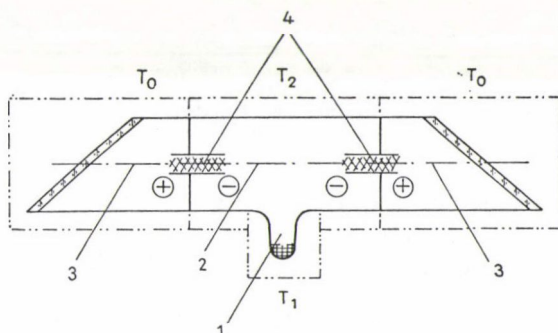
Az első lézereknél fémdarabokat helyeztek a kisülési csőbe vagy a kisülési cső katódjába és a csövet a kisülés (esetenként külső fűtés is) fűtötte fel a kívánt hőfokra. Ilyen módon azonban nem lehet a fém gőznyomását állandó értéken tartani és nem lehet a kisülés áramától függetlenül szabályozni.

Pontosabb méréseknél a fémeket külön nyúlványba helyezték el és a kisüléstől függetlenül fűtötték a kívánt gőznyomás által meghatározott hőfokra. A kisülési cső hőmérsékletének a nyúlvány hőmérsékleténél magasabbnak kell lenni, különben a fém az elektrodákra lecsapódik és a fém gőznyomását ezután már nem lehet szabályozni.

A Brewster ablakokat általában nem lehet a kívánt 100–500 °C-ra felfűteni. Védőkisülés segítségével visszatartható a fémgőz az ablaktól. Egy ilyen lézer különböző hőmérsékletű részeit a 18. ábrán láthatjuk.

A 18. ábra szerinti elrendezésben a fém gőznyomása csak T_1 függvénye, T_2 a fémgőz sűrűségére van befolyással, ennek kis változása megengedhető.

A katód porlása miatt bekövetkező gázmegkötés valamennyi üreges katódú lézernél problémát okoz. Ha azonban az 1. és 2. rész közötti hőmérsékletkülönbség



18. ábra. Különböző hőmérsékletű zónák üreges katódú lézerben. 1. kályha (hőmérséklete T_1), 2. az üreges katódú kisülés helye (hőmérséklete T_2), 3. a kisülési cső hideg része, ahová fém nem juthat el (hőmérséklete T_0), 4. pozitív oszlopú kisülés, amely a fémgőzt visszatartja a 2. részben

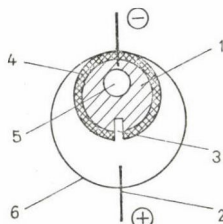
kicsi, megoldható, hogy a fémgőz csak a kisülés által bevont katódfelületre rakódik le és védi az alatta levő fémeket. Egyensúly alakul ki a kisülés hatására elpárolgó és oda lecsapódó fém között, miközben a gáznyomás nem változik. Ez a megoldás célszerűen összekapcsolható az ablakvédő pozitív oszlopú kisüléssel [48].

1.4.4. Katódporlásos üreges katódú lézerek

Számos fém, elsősorban a réz termszékémája valószínűsítette, hogy igen hatásos üreges katódú lézert lehetett volna rézgőz felhasználásával építeni, de a megfelelő, \sim kPa nyomású rézgőz előállításához jóval 1000° feletti hőmérséklet lett volna szükséges [37].

A Csillag L., Jánossy M., Rózsa K. és Salamon T. által felfedezett rézgőz lézer szobahőmérsékleten vízhűtött üreges katóddal működött és megfelelő gőznyomást a katód kisülés hatására történő porlása biztosította [49]. Ez a módszer utat nyitott a nehezen elpárolgatható fémek egyszerű alkalmazására üreges katódú lézerben.

Általában felhasított üreges katódokat használnak erre a célra viszonylag szűk, 1,5–2 mm széles felhasítással, mert nagyobb katódüregátmérőnél nehéz a megfelelő rézgőz nyomást biztosítani. A 19. ábrán egy ilyen kisülési cső keresztmetszetét látjuk [49].



19. ábra. Katódporlásos üreges katódú lézer. 1 — katód, 2 — anód, 3 — felhasítás (katódüreg), 4 — kerámia szigetelő, 5 — vízhűtés, 6 — üvegköpeny

Lézerműködést többféle fémgőz-nemesgáz elegyben fedeztek fel, ezek: Cu [49, 53], Ag [54, 55], Au [56] és Al [57, 58], hullámhossztartományuk a közeli infravöröstől a 220 nm-ig terjed. A 325 nm-nél rövidebb hullámhosszúságú folytonos lézerátmenetek mind ebbe a csoportba tartoznak. A legerősebb vonalakon elért lézer-teljesítmények megközelítik a pozitív oszlopú ionlézerek teljesítményét.

A legjellemzőbb átmenetek a következők:

CuII	259,0 nm,	259,9 nm,	270,3 nm,	467,4 nm,	493,2 nm	780,8 nm
AgII	224,3 nm,	227,8 nm,	318,1 nm,	478,8 nm,	502,7 nm	
AuII	282,2 nm,	755,6 nm				
AlIII	692,9 nm,	704,2 nm				

A széles hullámhossztartomány és a nagy teljesítmény ezeket a lézereket igen perspektivikussá teszi. Viszont a katódporlás hatására történő gázmegkötés és a nagy áramoknál fellépő instabilitások itt jelentik a legsúlyosabb problémát.

1.4.5. Illékony fémvegyületeket alkalmazó üreges katódú lézerek

Piper és Neely [59] a nehezen párolgó fémek halogénsóit használták (CuI, CuCl, CuBr) a tiszta fémek helyett, és a katódporlásos lézerek teljesítményével összemérhető teljesítményeket értek el.

A katódporlásos lézerekben a fémgőz koncentrációja a kisülési áram függvénye és csak nagyon nagy áramoknál (esetenként 20—50 A) lehet elérni az optimum körüli fémgőzkoncentrációt, a lézerműködéshez egyébként kisebb áram is elegendő lenne. Ha közvetlenül a rezet akarnánk elpárolgotatni, 1300—1400 °C hőmérséklet kellene, ezzel szemben pl. a CuCl elpárolgotatásakor az optimális hőfok 400—420 °C. Erre a hőfokra pl. az 1.3.4. pontban leírt módon a kisülési csövet fel lehet fűteni, és a lézer működtetéséhez szükséges áram kb. tizede a katódporlásos lézer áramának.

A lézer gerjesztési mechanizmusa a következő: először a fémvegyület gőzei disz-szociálnak a kisülésben, főleg elektronütközés hatására. Ezután jönnek létre a gerjesztett fémionok a nemesgázionok és a fématomok közötti töltéscicserélő ütközés hatására.

Megfelelő katódfalhőmérsékleten olyan ciklust lehet létrehozni, hogy az adott hőfokú katód falon a kiindulási vegyület visszaalakul a kisülésben felbomlott alkotórészeiből [60].

* * *

Az üreges katódú lézerek továbbfejlesztéséhez a nagyenergiájú elektronok számát és részarányát kellene növelni. Az áram növelése, lényegében változatlan energiaeloszlás mellett növelné az elektronok sűrűségét. A lézerteljesítmény általában nem telítődik az eddig elérhető áramértékeknél. A dolgozat egyik célkitűzése olyan lézerkonstrukciók kialakítása, ahol a ködfénykisülés széles áramhatárok között stabil.

Az elektronenergiaeloszlás kedvező irányú megváltoztatását eredményezné az égési feszültség növelése. Itt a célkitűzés annak megvizsgálása, hogy elérhető-e az égési feszültség növelése a gáznyomás, ill. a kisülési cső átmérőjének csökkentése nélkül.

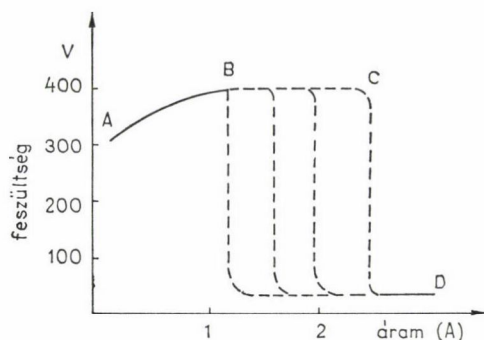
Ezeket a lehetőségeket a 2. és 3. fejezetben vizsgáltam meg. A 2. fejezet a nagyáramú, a 3. fejezet a nagyfeszültségű üreges katódú kisüléseket és lézereket, ill. az ezeken végzett méréseket tartalmazza.

2. NAGYÁRAMÚ ÜREGES KATÓDÚ LÉZEREK

2.1. Élvédett üreges katódú kisülési cső

Az üreges katódú lézereknél gyakori jelenség, hogy a lézerteljesítmény nem telítődik abban az áramtartományban, ahol a kisülés stabil, az optimális áramérték elérését megakadályozza az átmenet az ívkisülésbe.

Az ívkisülés kialakulását az üreges katódú lézer áramfeszültség karakterisztikáján követhetjük nyomon (20. ábra).



20. ábra. Üreges katódú lézer égési feszültségének függése a kisülési áramtól (A—C a ködfénykisülés, D az ívkisülés égési feszültsége)

A 300—400 V égési feszültség hatására kialakul az önfenntartó kisülés az 1.2 pontban leírtak szerint. A kisülés létrejötte után az áram növelésével enyhén növekszik az égési feszültség, de sokkal kevésbé meredeken mint sík katódnál (A—B szakasz). A B—C szakasz egy definiálatlan pontján a kisülés összehúzódik a katód mentén, majd egy pontban ugrik össze, az égési feszültség 30—80 V-ra csökken le, ekkor a katód egy pontja már olyan hőmérsékletre melegszik fel, ahol a termikus elektronemisszió a meghatározó folyamat, ívkisülés jön létre.

Az előző fejezetben bemutatott 17. ábra mutatja, hogy igen érdekes lett volna a He—Kr lézer vizsgálata nagyobb nyomásokon, de ekkor már viszonylag alacsony áramnál kialakul az ívkisülés. Célul tűztük ki, hogy meghatározzuk azokat a kisülési paramétereket, ahol a nagy térfogatú ködfénykisülés stabil, ill., hogy olyan lézerkonstrukciót keressünk, ahol az ívkisülés nagyobb áramnál alakul ki.

A kisülési cső tervezésénél több szempontot kellett figyelembe venni:

— Olyan kisméretű keresztirányú kisülést hasznosító kisülési cső építését tűztük ki célul, hogy csak a kisülési cső hosszát kelljen megnövelni a lézer építésekor, lehetőleg egyéb geometriai változtatás nélkül.

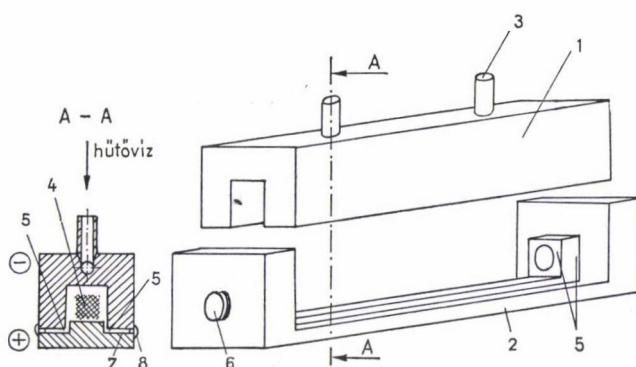
— A nagy áramsűrűség miatt a kisülési cső katódját hűteni kell. Az előző konstrukciókban (l. pl. 19. ábra) a hűtővizet a vákuumtérbe kellett bevezetni, ami nemcsak körülményes volt, de a kisülési cső üzembiztonságát is károsan befolyásolta. Ha a kisülési cső falát az elektródák alkotják, egyszerűvé válik a katód hűtése és az elektromos csatlakozásokat sem kell a vákuumtérbe bevezetni.

— Nagy áramsűrűségnél a kisülés a katód egész felületét igyekszik bevonni, ezért biztosítani kell, hogy a kisülés csak a katódüreg belsejében jöjjön létre.

— A katód felülete a kisülésben erősen porlik. Az elporlott fém a két elektróda között részint zárlatot okozhat, részint olyan új vezető felületeket hozhat létre, amelyek szintén részt vehetnek a kisülésben. A katód éleinek kerámiával vagy egyéb szigetelő anyaggal történő letakarását szintén a katódporlás miatt nem lehetett használni. Az elporlott fém rövid idő alatt bevonná a szigetelőanyagot. Kizárólag olyan megoldás jöhetett szóba, ahol az elporló fém csak fémfelületre rakódhatott le.

A fenti szempontok szerint épült csövet a 21. ábra mutatja.

A kisülési cső főbb méretei: aktív katódhossz: 20 mm, katódüreg: 6×10 mm. A katód és anód anyag vörösréz volt.



21. ábra. Élvédett üreges katódú kisülési cső. 1. katód, 2. anód, 3. vízhűtés, 4. az üreges katódú kisülés helye, az 5-tel jelzett helyeken nem jön létre kisülés, 6. ablak az optikai megfigyelés céljára, 7. teflon szigetelés, 8. epoxigyanta ragasztás

Az ábrán látható kisülési csőben csak a katódüregben jöhet létre kisülés. Az anód felső részének formája illeszkedik a katód alsó részéhez, és közöttük 0,5 mm távolságot tartottunk. Ennél a távolságnál a kisülés csak az üreges katódú kisülés égési feszültségénél sokkal nagyobb feszültségen jöhet létre. Így a gátolt kisülés jelenségének felhasználásával megakadályozhatjuk, hogy a katód élein is létrejöjjön kisülés.

A kisülési csövet 0,4–2,5 kPa nyomású tiszta héliumban, valamint 1,3 Pa kripton és hélium elegyében létrehozott kisüléssel vizsgáltuk. 2 kPa nyomásig a kisülés csak a katódüreg belsejében jött létre, a katód éleinek környéke szemmel láthatóan sötét maradt.

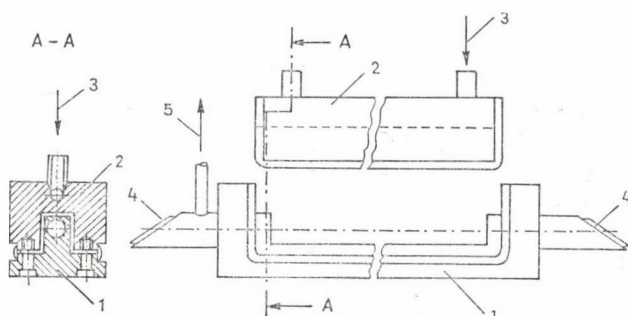
Együttesen egyenirányított 50 Hz váltóárammal hoztunk létre kisülést, az áram maximuma 1 A volt. A nagy áram hatására a katód erősen porlott, az elporlott fém által megkötött gázt időnként pótolni kellett. A kisülés egyenletesen égett több napon keresztül és nem jött létre ívkisülés. A kisülési cső szétszedése után szemmel látható volt, hogy a katód élein és csúcsain nem alakult ki kisülés, porlás csak a kisülés részére szabadon hagyott katódfelületeken látszott.

2.2. Élvédett üreges katódú lézer

Az 1 A áramnál is stabil kisülés igen biztató volt. A kisülésben az áram hosszirányban nem folyik, ezért úgy gondoltuk, hogy a kisülési cső hosszának növelése mellett, egyéb geometriai változtatás nélkül, a rövid kisülési csőben elért katód felületi áramsűrűséget hosszabb csőben is el lehet érni, 50 cm aktív hosszal terveztük az üreges katódú lézer építését, maximálisan 10–15 A áramig, ez az áramsűrűség csupán fele a próbcsőben elért áramsűrűségnek.

Mivel nagy áramsűrűségnél a réz erősen porlik, ezért a lézert kevésbé porló Al–Mg–Si ötvözetből építettük. A lézer céljára épített kisülési cső rajzát a 22. ábra mutatja.

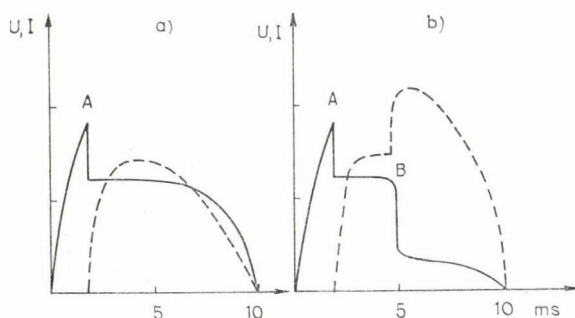
A vákuumrendszerhez csatlakoztatott kisülési csőben a kezdetben elérhető nyomás 10^{-2} Pa volt. A csövet a teflon és epoxigyanta miatt vákuumban nem lehetett



22. ábra. Élvédett üreges katódú lézer. 1. anód, 2. katód, 3. vízhűtés, 4. Brewster ablakok, 5. csatlakozás a vákuumrendszerhez

kifűteni, ezért ismételt kisüléssel és leszívással tisztítottam. A tisztítási folyamat alatt az ívkisülés nélkül elérhető maximális áram fokozatosan nőtt, de sokkal kisebb áramsűrűséget lehetett elérni mint a 2 cm-es próbacsőben. (Kezdetben 1 A, később néhány amper volt a maximálisan elérhető áram, ami kb. egy nagyságrenddel kisebb áramsűrűséget jelentett.) Növekvő nyomásnál a kisülés alacsonyabb áramértéknél ment ívkisülésbe. He—Kr elegyben 2 kPa nyomáson 2—3 A-nál vártuk a lézerműködés elindulását, a biztonságosan elérhető áram ennél kisebb volt.

Az együttesen egyenirányított váltóárammal létrehozott kisülés vizsgálatainkhoz igen alkalmasnak bizonyult. Egyenáramú kisülésben az egyszer kialakult ívkisülést nehéz egyszerűen és gyorsan kikapcsolni, az egy pontra jutó tartós, nagy áram a berendezést tönkretetheti. A 7—8 ms hosszúságú impulzus alatt, ha létre is jön az ívkisülés, ez az impulzus lefutása után automatikusan kiolszik. Az áram- és feszültségértékek, valamint az ívkisülés létrejötte szépen látható oszcilloszkópon. Tipikus oszcilloszkóp ábrákat láthatunk a 23. ábrán.



23. ábra. Üreges katódú kisülés áramának és feszültségének időbeli lefutása együttesen egyenirányított váltóárammal létrehozott kisülésben. Szaggatott vonal: áram, folytonos vonal: feszültség a kisülési cső sarkain. A kisülés az A időpontban gyújt be, a B pontban kialakul az ívkisülés

Az ábrán végig követhetjük a feszültség és áram időbeli lefutását. Kezdetben a kisülési csövön nem folyik áram, az A pontban a feszültség eléri a gyújtáshoz szükséges értéket. Ekkor a kisülés megindul, a feszültség leesik az égési feszültség értékére. Az égési feszültség széles tartományban független az áramtól, majd az impulzus végén a kisülés kialszik. A 23b. ábrán látható a ködfénykisülés átmenete ívkisülésbe (B). Az AB szakaszban itt is ködfénykisülés van jelen.

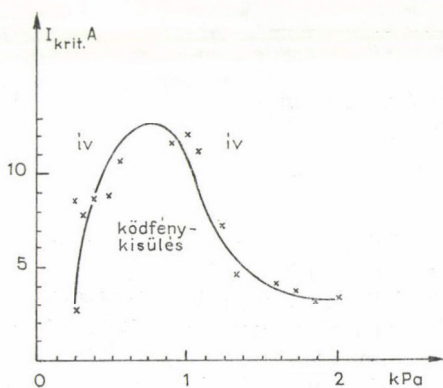
Gyakorlati szempontból lézereknél csak olyan áramértékek jöhetnek szóba, ahol a kisülés még biztosan nem ível be. Bár már a tisztítókisüléseknél egyértelművé vált, hogy a lézercső hosszának növelése a kisülés stabilitásának csökkenését eredményezte, a további lézercsővel való összehasonlításhoz meghatároztuk azt a nyomás-áram tartományt, ahol a ködfénykisülés még stabil [12].

A mérés elvégzéséhez a csövet 10^{-4} – 10^{-5} Pa nyomásra leszívtuk, majd adott nyomású héliumot töltöttünk be. Az áramot fokozatosan növeltük, amíg a kisülés nem ment át ívkisülésbe. Egy áramérték alatt gyakorlatilag ívmentes a kisülés, ezután az összes impulzus néhány ezreléke eredményez ívkisülést, további 0,2 A áramnövelés hatására az impulzusok néhány százaléka ad ívkisülést és tovább az áram gyakorlatilag nem is növelhető ívkisülés kialakulása nélkül.

Az „ívelési kritikus áram”-ot ilyen módon 0,2–0,4 A bizonytalansággal definiálni lehetett, és mivel a kritikus áram tényleges értéke esetünkben általában több amper, ez a pontosság gyakorlati célokra megfelelt. A kritikus áram igen érzékeny volt a szennyezésekre. Az ívelés folytán felszabaduló szennyező gázok hatására értéke lecsökkent. Ekkor a kisülési csövet vákuumra leszívtuk, tiszta héliummal töltöttük meg, és néhány percre a kritikus áramérték 50%-ával bekapcsoltuk a kisülést. Így az ívelés hatására a felületen kialakult élesebb csúcsok elporlottak és a kritikus áramot 0,2 A-en reprodukálni lehetett.

Az 50 cm hosszú élvédett 7×12 mm keresztmetszetű katódüregben a kritikus áram nyomásfüggését a 24. ábrán láthatjuk.

A görbe alapján definiálhatunk egy „optimális gáznyomás”-t. Ez az az érték, ahol a legnagyobb áram érhető el ködfénykisülésben. Méréseink szerint az adott geometriai méretek mellett ez az érték héliumban $\sim 0,8$ kPa.



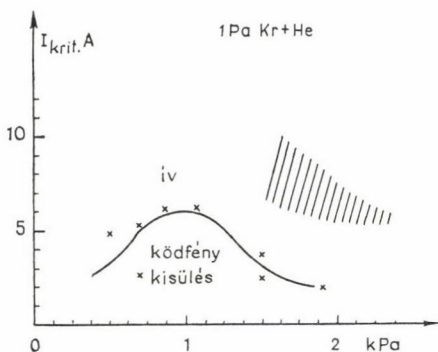
24. ábra. Az ívelési kritikus áram nyomásfüggése héliumban

Kutatásaink a He—Kr lézer fejlesztésének részét képezték, ezért meghatároztuk a kritikus áram nyomásfüggését 1 Pa kriptont tartalmazó héliumban is. A mérési pontok szórása sokkal nagyobb volt mint héliumban, és az ívelési kritikus áram a bekapcsolás után fokozatosan nőtt, 5—10 perc múlva el lehetett érni a héliumban mért érték 70—80%-át is, de ekkor a kisülés színeképében a kriptonvonalak intenzitása a kiindulási értékeknek kb. tizedére csökkent. A He—Kr lézernél is igen zavaró katarforézis, ill. kriptonmegkötés miatt csak tájékoztató értékeket sikerült megállapítani. A kisülés bekapcsolása után 20—30 másodperccel mért értékek reprodukálhatóak voltak (eddig a kripton színeképvonalainak intenzitása sem változott számottevően). Ezután a kripton koncentrációja csökkent. Egyértelműen meg lehetett állapítani, hogy a kripton nyomokat tartalmazó héliumban a kisülés instabil és a cső tisztításakor tapasztalt egyéb szennyezéseket tartalmazó héliumhoz hasonlóan viselkedik.

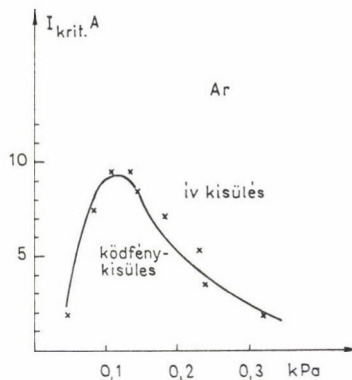
A 25. ábra mutatja az ívelési kritikus áram nyomásfüggését 1 Pa kriptont tartalmazó héliumban. Az ábrán láthatjuk azt a tartományt is, ahol a He—Kr lézer működése várható volt az adott katódüreg átmérő mellett.

A 25. ábra azt is mutatja, hogy a kísérletben vázolt berendezés alkalmatlannak bizonyult a He—Kr lézer vizsgálatára.

A kritikus áram a He—Ne 5:1 arányú elegyében nem tért el számottevően a tiszta héliumban mért értékektől, az optimális nyomásérték azonban kb. 20%-kal alacsonyabbnak adódott.



25. ábra. Az ívelési kritikus áram 1 Pa kriptont tartalmazó héliumban. A bevonalkázott terület jelenti a He—Kr lézer valószínű működési területét a 6 mm átmérőjű katódüregben

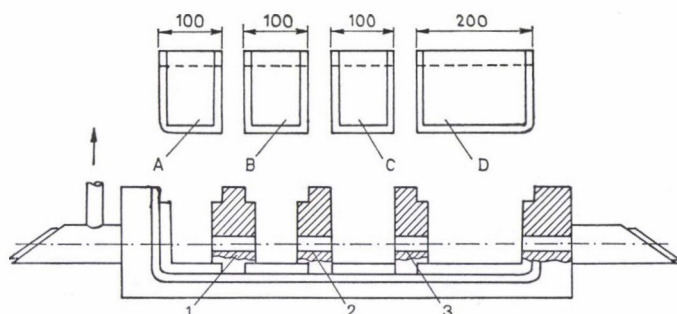


26. ábra. A kritikus áram nyomásfüggése argonban

Hasonló lefutású a kritikus áram nyomásfüggése argonban is, de az optimális nyomásérték sokkal kisebb, kb. 0,1 kPa (26. ábra).

A mérési adatokból kitűnik, hogy bár a kisülés kizárólag keresztirányban folyik, még a katód sem szabadon választható paraméter. A 2 cm hosszú katódüregben könnyen elérhető áramsűrűséget meg sem tudtuk közelíteni nagyobb katódhossznál.

További vizsgálatokat végeztünk a katód hosszának függvényében. A 22. ábrán látható kisülési cső munkaiigényes anódját meghagytuk, és ebbe elválasztó elemeket építettünk be a 27. ábrán látható módon.



27. ábra. Üreges katódú kisülési cső a kritikus áram katódhossztól való függésének mérésére. 1, 2 és 3 utólag beépített anóddarabok az egyes katódok elválasztására. A, B, C és D az egyes katódelemek

Az egyes katóddarabok között a katódvégek lezárásánál használt geometriájú elválasztó elemek biztosították a katódok éleinek védését. 200 és 100 mm hosszú elemeket tudunk így összehasonlítani az eredeti (500 mm) katóddal. A 2 és 3 elemek úgy lettek megépítve, hogy a közöttük levő katóddarab végén kialakuló élt nem védte a kisüléstől a benyúló anódrész.

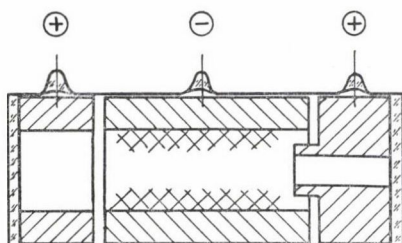
A közös anód felhasználásával az egyes katóddarabokra egyenként és együtt is rá lehetett kapcsolni a gázkisülést.

Az ívelési kritikus áram $\sim 10\%$ mérési bizonytalanságon belül a 100 és 200 mm-es katód szegmensekben is megegyezett az 500 mm katódban talált értékkel. Az üreges katódú lézerek szempontjából igen fontos és meglepő adatot kaptunk; 100 és 500 mm katódhossz között a ködfénykisülés stabilitását elsősorban a kisülés összaráma és nem a katód felületi áramsűrűsége határozza meg. (Nemrégiben H. Störi eredményei is ezt a megállapítást támasztották alá: argon gázban, 10 méter (!) hosszú katódban vizsgálta a stabil kisülés tartományát. Az eltérő geometria és a nagyságrenddel nagyobb hossz ellenére sem az optimális áram, sem a kritikus áramértékek nem különböztek 50%-kal az általunk mért értékektől [61]. Méréseink szerint a rövidebb katód szegmensekből összerakott lézer stabilitásának (ld. pl. 15. ábra) megfelelőbbnek kell lenni.)

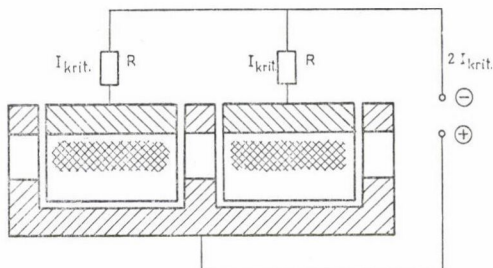
Meglepő adat volt az is, hogy a 27. ábrán ábrázolt 2 és 3 elemek közé beépített katód szegmens stabilitása sem volt rosszabb, pedig a katód végét nem takarta le anóddarab. A választ a kisülési cső szétszedése után látni lehetett: a katód felületének arról a részéről, amelyik az anód közvetlen közelében van (a távolság kb. a gátolt kisüléshez tartozó hosszúság) nem indul kisülés, részben a kis távolság miatt, részben azért, mert az anód taszítja az ionokat.

Így pl. a 28. ábrán szemléltetett kisülési cső katódjának mindkét végén az élek egyformán védettek a kisüléstől, a bevonalkázott rész szemlélteti a katód kisüléssel borított részét. Ez a tapasztalat jelentősen egyszerűsítette a további lézerek építését.

Megvizsgáltuk, hogy ha az egyes katódszakaszokat közös anódról párhuzamosan kapcsoljuk a kisülésbe, továbbra is elérhető-e a katódszakaszon a külön-külön elért áramérték. Két 100 mm hosszú katódszakaszt kapcsolunk a kisülésbe, és a katódokra külön-külön ellenállást kötöttünk (29. ábra).



28. ábra. Üreges katódú kisülési cső. A katód felületének csak a bevonalkázott részén (A) jön létre kisülés



29. ábra. Két katód párhuzamos bekötése

A katódszegmensekkel párhuzamosan kötött ellenállások szerepe kettős: egyrészt korlátozza az áramot, ha ívkisülés alakul ki, másrészt megakadályozza, hogy a teljes áram az egyik katódon alakítson ki ívkisülést; ha az egyik katódon növekszik az áram, növekedni fog a hozzákötött ellenálláson a feszültségesés. Várákozásunknak megfelelően az egyes katódszegmensek kritikus árama nem változott meg, két katód együttes kritikus árama kétszerese lett az egyes katód kritikus áramának. Két részre osztott katóddal így a kritikus áramot meg lehetett kétszerezni.

Meglepő jelenség volt, hogy amikor a két katódot ellenállás nélkül, közvetlenül összekötöttük, a kritikus áram a kétszeres érték maradt. (Például: adott nyomáson a 100 mm és 200 mm hosszú katód szegmens kritikus árama is 5 A. Két, ellenállások nélkül összekötött 100 mm hosszú katód kritikus árama a 28. ábra szerinti elrendezésben 10 A.) Ez a tapasztalat arra utal, hogy magának a kisülésnek részekre osztása bír alapvető jelentőséggel.

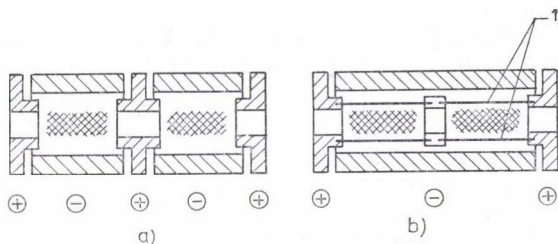
2.3. Üreges katódú lézer osztott kisüléssel

A 2.2. pontban tapasztalt jelenségek magyarázatára és az ívkisülés kialakulásának mechanizmusára a következő egyszerű, hipotetikus modellt alkalmazhatjuk: Amikor a folytonos kisülési plazmában a lokális ionsűrűség elér egy kritikus értéket, a katód elektronemissziója egy pontban, főleg a melegítés hatására megnövekszik. Ha a katód ezen pontján az égési feszültség csökken, pozitív visszacsatolás lép fel, és a kisülés ívkisülésbe megy át, ahol már a termikus elektronemisszió a meghatározó, és az égési feszültség 40–80 V-ra csökken le.

A katódhossztól független kritikus áram ebben a képben azt jelenti, hogy a kisülésben a töltéshordozók száma nem nagyon függ a katód hosszától és elsősorban az összáram függvénye.

Kísérleti tapasztalat, hogy katódhossztól függetlenül egy adott áramhoz gyakorlatilag azonos égési feszültség tartozik, az égési feszültség széles áramsűrűség határok között gyakorlatilag állandó (ld. pl. 20. ábra), és csak a gáznyomástól függ. A kritikus áram egy összefüggő plazmához tartozó áram, és pl. a 29. ábra szerint összeépített és összekötött két darab katódszegmenshez két független kisülési plazma tartozik, még akkor is, ha nincs közöttük ellenállás. A két katód szegmens közötti anóddarab taszítja az ionokat és az ívkisülés létrejöttéhez az egyes katód szegmensekben külön-külön el kell érni a kritikus áramot.

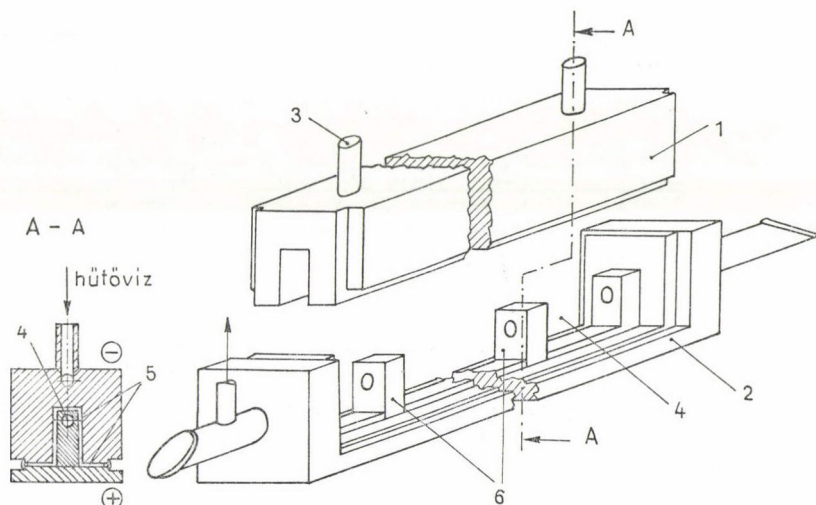
A kritikus áram ilyen értelmezéséből következik, hogy az egy katódhoz tartozó kritikus áram is növelhető, ha meg tudjuk oldani, hogy a katódüregben a kisülési plazmát független részekre osszuk fel. A 30. ábrán két lehetséges megoldás látható a plazma két részre osztására.



30. ábra. Két független részre osztott üreges katódú kísérlet; a) két független katódot, b) egy darabból álló katódot tartalmazó kísérlet. A negatív fény helyét kereszt-sátfűzőással jelöltük: 1 — anódgyűrűt rögzítő szálak

Mindkét esetben a középre helyezett anódgyűrű miatt a kisülés két független részből állónak tekinthető. A 30b. ábrán látható megoldáshoz hasonló elrendezés könnyen létrehozható az eredeti élvédett kisülési cső minimális átalakításával.

Változtatás nélkül visszaépítettük a 22. ábrán bemutatott külségi cső katódját, csupán az anódba építettünk be a 31. ábrán látható módon kis hasábokat, amikkel a külsést kívántuk független részekre osztani. Feltételezzük, hogy ezek az osztóelemek akkor is effektívek, ha lényegében csak a katód sötét térben vannak elhelyezve. A negatív fény területét szabadon kell hagyni a lézerműködés biztosítása céljából.

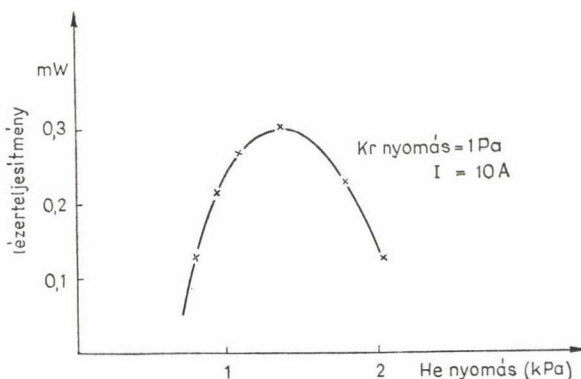


31. ábra. Üreges katódú kisülési cső anódelemek felhasználásával osztott kisüléssel; 1. katód, 2. anód, 3. vízűtés, 4. üreges katódú kisülés helye.
Az 5-tel jelzett helyen nem jön létre kisülés; 6. anódhasábok a kisülés felosztása céljából

Ilyen módon kilenc darab 5 mm széles hasábot építettünk az anódba, ezekkel tíz részre osztottuk a kisülést. Tegyük fel, hogy 45 mm hosszban is független az ívelési kritikus áram a katód hosszától és az anóddarabokkal osztott kisülés egyenértékű a külön katódelemekből épített kisüléssel. Az átalakításnak így a kritikus áramot tízszeresére kellene növelnie.

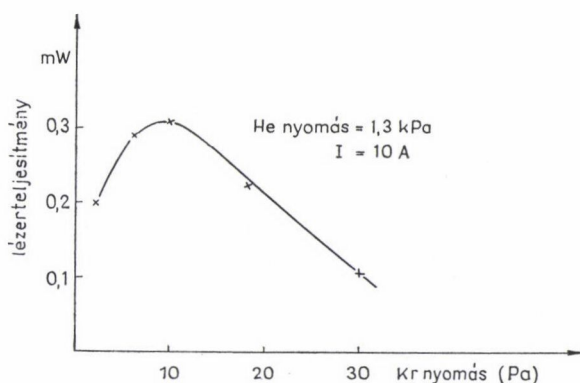
A tápegység terhelhetősége azonban csak 15 A volt. 0,4–1,6 kPa nyomású héliumban és 0,06–0,25 kPa argonban próbáltuk a kritikus ívelési áramot meghatározni, a kisülés azonban 15 A-ig a teljes nyomástartományban stabil maradt. A rendelkezésre álló tápegységgel így annyit sikerült bebizonyítani, hogy a nagynyomású szakaszban a küszöbáram 5–6-szorosára emelkedett. 15 A-nál nagyobb árammal nem terveztünk vizsgálatokat, így célunknak a kisülési cső teljesen megfelelt. A nagy stabilitásra azért is szükség volt, mert He—Kr gázelegyenben a kisülés sokkal könnyebben megy át ívkisülésbe és előző mérési adatainkból extrapolálva nagyobb áramnál növelhető a kripton koncentrációja is. A kripton koncentráció növelése gyakorlati szempontból is jelentős. A 0,1 Pa nagyságrendű kripton 1–1,5 kPa nyomású héliumban csak igen rövid idejű lézerműködést tesz lehetővé. A nagy áramú kisülésben a kripton színképvonalainak intenzitása fokozatosan csökken, a katód közelében levő nagy térerősség hatására létrejövő kataforézis néhány perc alatt is csökkenti a kisülésben a kripton koncentrációját.

A nagy áramú kisülésben (10 A) a He—Kr lézer stabilan működött, az optimális kripton nyomás 10 Pa körül volt 1 kPa nyomású héliumban. A viszonylag nagy kripton nyomás mellett a kataforézis nem befolyásolta jelentősen a lézerműködést. A lézerteljesítményt a He nyomás függvényében a 32., a kisülési áram függvényében a 33., a kripton parciális nyomásának függvényében a 34. ábra mutatja.

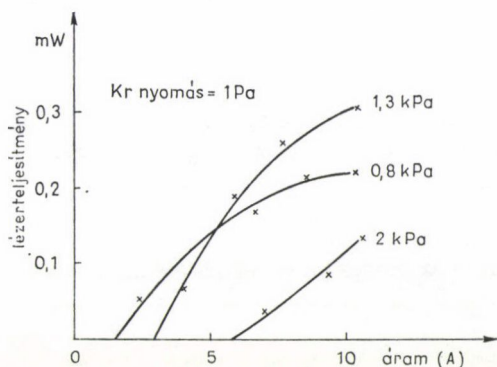


32. ábra. A He—Kr lézer teljesítménye a He nyomás függvényében

A 32–34. ábrákon feltüntetett lézerteljesítmény értékeknél lényegesen több, 10–15 mW lézerteljesítmény érhető el a lézertükrök optimális transzmissziójának megválasztásával. A mérésekhez azonban maximális reflexiójú tükröt használtunk, hogy a lézert a kisülés paramétereinek széles tartományában vizsgálhassuk.



33. ábra. A He—Kr lézer teljesítménye a kripton nyomás függvényében



34. ábra. A He—Kr lézer teljesítménye a kisülés áramának függvényében, a paraméter a He nyomása

A 10—30 Pa parciális nyomású kriptont tartalmazó héliumban stabilan elérhető 10 A áram meggyőzően bizonyítja az ilyen típusú konstrukciók használhatóságát. Osztatlan kisülési csőben az ívelési kritikus áram a gáznyomástól függően csak 3—6 A volt egy nagyságrenddel kisebb kriptonkoncentráció mellett.

A kritikus áram függése a különböző kisülési paraméterektől szembevető hasonlatosságot mutat a pozitív oszlopú gázlézerekben létrejövő zajnak a kisülés paramétereitől való függésével.

A pozitív oszlopú kisüléseknél ismert jelenség, hogy bizonyos kisülési paraméterek mellett a lézer igen zajossá válik. Ez a zaj az 5—20 kHz közötti frekvenciatartományban jelentkezik, időnként szabályos oszcillációk kialakulásához is vezethet. Ezt a jelenséget He—Ne lézerben Suzuki [62], majd Rózsa K. és Salamon T. [63] vizsgálta részletesen. Meg lehetett különböztetni egy „zajmentes” és egy „zajos” kisülési tartományt. A két tartomány közötti átmenet egy, a kisülés paramétereire által meg-

határozott „küszöb” áramnál jelentkeznek. Az áramküszöb és az ívelési kritikus áram közös jellemzői:

- A zajos szakasz, ill. az ívkisülés egy bizonyos áramérték fölött jelentkezik.
- Ez az áramérték tiszta héliumban nagyobb mint egyéb gázokban.
- Ha a hélium alacsony ionizációs potenciálú gázt, fémgőzt vagy szennyezést tartalmaz, a küszöbáram jelentősen lecsökken.
- A gáznyomás, ill. az alacsonyabb ionizációs potenciálú komponens nyomásának növekedésével a küszöbáram csökken.
- A kisülés részekre osztásával a küszöbáramot növelni lehetett az osztások számával arányos mértékben.

A pozitív oszlopú kisülésben kialakuló zajért *Oleson és Cooper* [64] vizsgálatai szerint a kisülési csőben kialakuló ionizációs hullámok a felelősek, melyek lokálisan nagy ionsűrűséget és elektronsűrűséget eredményeznek. A megnövekedett elektronsűrűség és elektronhőmérséklet a pozitív oszlopú He—Cd lézerben megnövekedett populáció inverziót is eredményez (*Jánossy M.* [64]).

A hasonlóság alapján kézenfekvő feltételezni, hogy hasonló fluktuációk eredményezik a nagytérfogatú üreges katódú kisülés átmenetét az ívkisülésbe. Természetesen ekkor tartós zaj, ill. oszcilláció nem tud kialakulni, mert ha a lokális ionkoncentráció egy küszöbértéket elér, az égési feszültség rohamosan csökken és kialakul az ívkisülés. Rövid üreges katódú kisülési csöveknél, ahol nagy áramsűrűséget lehet elérni, nagy áramoknál megfigyelhető a jellegzetes, küszöbszerűen fellépő zaj.

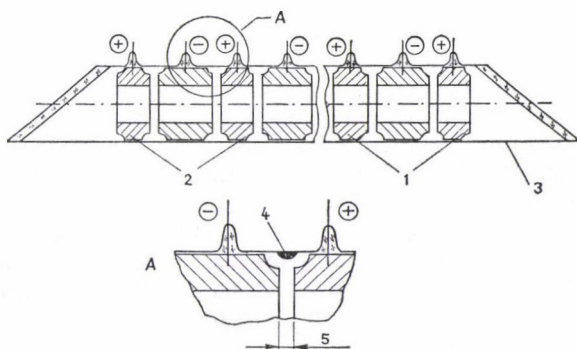
A 24—26. ábrákon látható, hogy egy viszonylag szűk nyomástartományban csak igen nagy áram felett jelentkezett az ívkisülésbe történő átmenet. Ez az optimális nyomás héliumban 0,6—0,9 kPa, argonban 0,12 kPa. A vizsgált katódüreg átmérő mellett ez a nyomás megfelel az üreges katódú effektushoz tartozó nyomásnak. Ebben a nyomástartományban az üreges katódú kisülésekben (és lézerekben) a zajszint rendkívül alacsony [66].

Az üreges katódú effektushoz tartozó nyomásérték alatti nyomáson az égési feszültség gyorsan növekszik (l. 1.3. pont, 9. ábra). A nagy égési feszültség és az alacsony nyomás növeli a katód falába csapódó ionok energiáját, így kisebb lokális ionsűrűség hatására is kialakulhat ívkisülés. Ha ebben a nagyfeszültségű szakaszban a katód elektronemissziója megnövekszik, ez az égési feszültség hirtelen lecsökkenését eredményezi.

Az a nyomástartomány, ahol az égési feszültség nagy, rendkívül instabil, ez a fő akadálya üreges katódú lézerek építésének a nagyfeszültségű és kisnyomású szakaszban. (A katódfelület egészen finom osztása minőségileg új kisülést jelent; erről a következő fejezetben lesz szó.)

A 31. ábrán bemutatott kisülési cső csak nagy katódüregátmérőknél, következésképpen viszonylag alacsony nyomáson felelt meg. Az osztóhasábok takaró hatása miatt a katódüregátmérőnél 2 mm-rel kisebb a szabad optikai keresztmetszet. 4—5 mm-es szabad keresztmetszethez így 6—7 mm-es katódüregátmérő tartozik.

A szűkebb katódüregátmérőnél, így nagyobb nyomásoknál is használható megoldást mutat a *Sugawara* által használt (13. ábra) kisülési csővel lényegében azonos 35. ábrán látható kisülési cső. A nagyobb nyomás érdekében lemondunk a keresztirányú kisülésről.



35. ábra. Szegmentált üreges katódú He—Kr lézer kisülési csőve, 1. katódszegmensek, 2. anódszegmensek, 3. pyrex üveggöpeny, 4. a katódporlás hatására létrejövő fémtükör, 5. katód—anód távolság

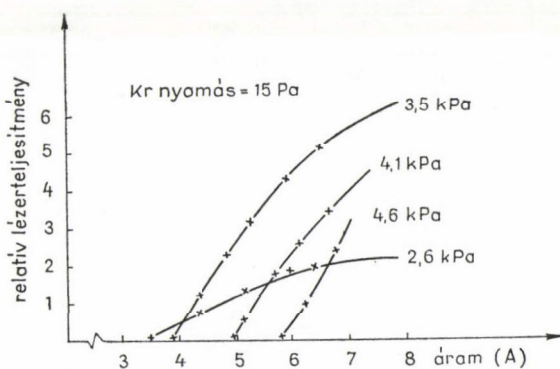
Ennél a lézernél lényegesek a következő szempontok:

— A katód és anód közötti távolság (5-tel jelezve a 35. ábrán) 0,5 mm. Nagyobb távolságnál itt is létrejönne kisülés.

— A kisülésben elporló fém bevonja az üveggöpeny belső falát. A porló fém a katódüreg belsejéből gyakorlatilag egyenes vonalban halad, ha az elektródaszegmensek végeit a 35. ábrán látható módon képezzük ki, az üvegfalon kialakuló fémtükör nem tud zárlatot létrehozni az elektródák között.

— Az egyes katódszegmensek hossza (az 1.4.1. pontban tárgyalt okok miatt) nem lehet túl nagy a katódüreg átmérőjéhez képest.

A kisülési cső fontosabb méretei: katódüreg átmérő 3 mm, katóddarabok hossza 30 mm, teljes aktív hossz 540 mm. Az eddig vizsgált lézerkonstrukciók közül ez a lézer adta a legnagyobb teljesítményt He—Kr gázelegyenben. Az optimális adatok ($P_{Kr} = 7,8 \text{ Pa}$, $P_{He} = 3,6 \text{ Pa}$) mellett 8 A kisülési árammal 12 mW lézerteljesítményt értünk el. A lézerteljesítmény áramfüggését különböző He nyomásokon a 36. ábrán láthatjuk.



36. ábra. A hélium—kripton lézer teljesítménye különböző He nyomásokon a kisülés áramának függvényében

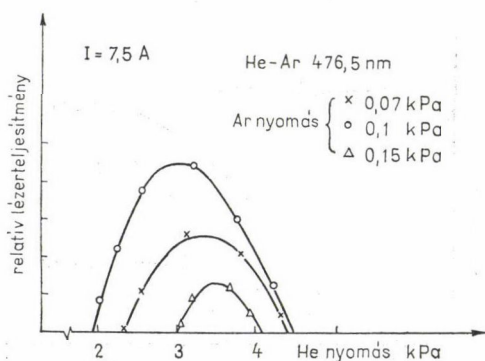
A 34., 36., ill. 17. ábrák hasonlósága szembetűnő. A nagyáramú üreges katódú vizsgálatok előtt is látszott, hogy alacsony nyomásokon a küszöbáram alacsony, de a lézerteljesítmény gyorsan telítődik. A nyomás növelésével a küszöbáram növekszik, de a lézerteljesítmény egyre meredekebben nő, és az áram további növelésének az ívkisülés kialakulása szabott határt. Az osztott kisülések szélesebb áramtartományban tették lehetővé a vizsgálatokat. Lehetőség adódott a nyomás további növelésére, ekkor a küszöbáram tovább nőtt, egyre nagyobb lézerteljesítményt lehetett elérni, de az egyre nagyobb nyomásokon az optimális áram elérését a kisülés instabilitásai nem teszik lehetővé. Abszolút optimumot a He—Kr lézernél nem találtunk, egy adott áramértékhez tartozik egy optimális nyomás, ha ezt az áramot tovább növeljük, az egyre nagyobb áramhoz egyre nagyobb optimális nyomás és lézerteljesítmény adódik.

A viszonylag nagy gáznyomáson a lézervonal homogén kiszélesedést mutat, és a TEM₀₀ módban működő lézer egyetlen longitudinális módban működik, anélkül, hogy a rezonátorba frekvenciaszelektív elemet kellene helyezni [67].

A nyomás növelésének további gyakorlati jelentősége is van. A gyakorlati célokra is használható lézer építésének (a stabilitási problémák mellett) fő akadály a katódporlás. A porlófém idővel rövidzárlatot okozhat és megköti a kisülési csőbe betöltött gázt. Üzemeltetés alatt a gáznyomás folyamatosan csökken. Minél nagyobb azonban a gáznyomás, annál kevésbé porlik a katód, és a nagy nyomású gázból megkötött kismennyiségű gáz hatására a lézerműködés paraméterei nem változnak számottevően.

Jánossy M. [30] impulzus üzemű pozitív oszlopú kisülésben végzett vizsgálatai azt mutatták, hogy a He—Kr lézerhez hasonlóan a He—Ar és Ne—Xe gázkeverekben is várható folytonos lézerműködés az üreges katódú kisülésben. A 35. ábrán látható lézercsőben először sikerült folyamatos lézerműködést létrehozni az Ar ion 476,5 nm vonalán [68]. A lézer küszöbárama 5,5 A, a lézer teljesítménye lineárisan növekszik az áram növelésének hatására. A lézer teljesítményét a gázösszetétel függvényében a 37. ábra mutatja.

A legnagyobb vizsgált áramértéken (8,2 A) elérhető lézerteljesítmény (30 μ W) kb. egy nagyságrenddel volt kisebb, mint hasonló körülmények között a He—Kr lézer teljesítménye. A lézer erősítése is arányosan kisebb, így az a tény, hogy sikerült



37. ábra. A He—Ar lézer teljesítménye a hélium nyomás függvényében, különböző argon parciális nyomások mellett

He—Ar elegyben lézerműködést elérni, mutatja az általunk kidolgozott konstrukciós elvek helyességét. Megpróbáltunk lézerműködést létrehozni Ne—Xe gázelegyben is, de ezek a próbálkozásaink ekkor még sikertelenek maradtak.

Bár a nagynyomású üreges katódú kisüléseken végzett vizsgálataink a gázlézerek kutatása szempontjából jelentősnek mondhatók (új lézerátmenet felfedezése, vizsgálatok a nagynyomású tartományban, a katód szegmensekre osztásának általános gyakorlattá válása az üreges katódú lézerek kutatásában) mind az ív kisülés kialakulásának vizsgálata, mind a stabil üreges katódú lézerek megépítése további kutatásokat igényel. Gyakorlati szempontból fontos előttünk álló feladat a stabil kisátmérőjű, nagynyomású és keresztirányú kisülést hasznosító gázlézer megépítése.

G. J. Collins a katódporlásos lézereken végzett vizsgálatai nagy részében egy darabból álló, felhasított katódot és alatta elhelyezett anódhálót használt. A lézer 200 μ s áramimpulzusokkal működött, az ilyen időtartamú kisülés mind az önfenntartó kisülés alakulása, mind a vizsgált lézerek gerjesztésénél számbajövő lényeges folyamatok szempontjából egyenáramnak tekinthető. Ilyen rövid időtartam alatt azonban nem mindig alakul ki az ív kisülés. Kísérleteink egy részében az impulzus leszálló ágában, 3—4 ms-sal a kisülés begyújtása után alakult ki ív kisülés. A 200 μ s impulzusokkal elért áramértékekről csak annyit mondhatunk, hogy az adott körülmények között az ív kialakulásához szükséges idő 200 μ s-nál hosszabb. Hasonlóképpen a dolgozatban közölt kritikus áram-gáznyomás görbéről (24—26. ábra) is csak annyit mondhatunk, hogy a kritikus áramértékek azt jelentik, hogy az ív kialakulásához szükséges idő 7—9 ms-nál hosszabb. Az egyenáramú lézerek építéséhez további vizsgálatok szükségesek.

A katódporlásos lézerek égési feszültsége növekvő árammal növekszik, míg a nyomás növelésével az égési feszültség gyakorlatilag függetlenné válik az áramtól. Ha az ív kisülés kialakulása előtt a lokális áramsűrűség növekedése az égési feszültség növekedését eredményezi, ez a jelenség stabilizálhatja a ködfénykisülést.

A kisülés áram—feszültség karakterisztikájának függése a kisülési cső konstrukciójától, ill. az áram—feszültség összefüggés kapcsolatának vizsgálata a kisülés stabilitásával szintén célszerűnek látszik.

További vizsgálatok szükségesek a kisülés zaja és az ív kisülés kialakulása közötti kapcsolatról is. Bár az ív kisülést ezekben a rendszerekben katódjelenségnek foghatjuk fel, a zajszint kialakulásában az egész kisülési cső konstrukciójának (anód körüli tér, hálószerű anód, katódüreg kialakítása stb.), valamint az elektromos tápegység jellegének is szerepük lehet, és a zajszinten keresztül a ködfénykisülés stabilitását is befolyásolhatják.

A kritikus áram-gáznyomás görbék alakjának vizsgálata sincs befejezve. Kétségtelen, hogy a kisülés zaja az üreges katódú effektus környékén a legkisebb és a héliumban, héliumneon elegyben, valamint argonban is a mért optimális nyomás megegyezik az üreges katódú effektushoz tartozó nyomásértékekkel. Annak vizsgálata azonban, hogy a katódüreg átmérőjének megváltoztatásával is ugyanaz marad-e a maximális kritikus áramhoz és az üreges katódú effektushoz tartozó nyomás, még előttünk álló feladat.

3. SZABÁLYOZHATÓ FESZÜLTSGŰ ÜREGES KATÓDÚ KISÜLÉSEK

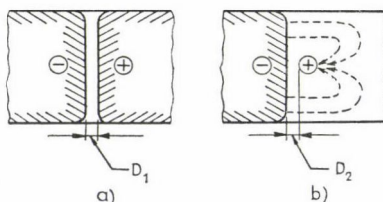
Az üreges katódú kisülésben létrejövő hatásos gerjesztést a katódesés által felgyorsított elektronok hozzák létre. Az elektronoknak azonban itt is csak nagyon kis hányada rendelkezik a gerjesztéshez szükséges energiával (1. 2. és 3. ábra). A nagyenergiájú elektronok részarányának növelése változatlan gáznyomás mellett javítaná a gerjesztés hatásfokát.

A katódüreg átmérője, a gáznyomás és a kisülés árama szabadon választható paraméterek, de ezek meghatározzák az égési feszültséget és így a katódesést is. Ebben a fejezetben olyan üreges katódú kisülésekről lesz szó, ahol az égési feszültség szabad paraméter, függetlenül megválasztható a gáznyomás, az áram és a katódüregátmérő változatlanul hagyása mellett.

3.1. A „HAC” kisülés

Ha adott nyomáson és adott katódüregátmérő mellett az üreges katódú kisülés égési feszültségét növelni kívánjuk, az önfenntartás feltételeit kell megváltoztatni. Ezután még fennmarad a kérdés, hogy ez a ködfénykisülés meddig marad stabil, azaz milyen áramértéknél megy át ívkisülésbe. Az ívelési kritikus áram vizsgálatánál láttuk, hogy az a kisülési tartomány, ahol az égési feszültség magas, csak igen kis áramoknál ad stabil ködfénykisülést.

A szabályozható kisülés elve lényegében a gátolt kisülés alkalmazása az üreges katódú kisülésekre [12, 69]. A 38. ábrán kétféle elektróda elrendezést láthatunk, ahol azonos az elektródák távolsága és a gáznyomás, az égési feszültség azonban nyilvánvalóan különbözik.



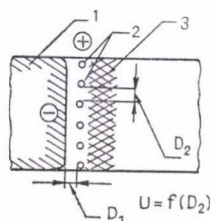
38. ábra. Nagyfeszültségű (gátolt) kisülés (a) és alacsonyabb feszültségűkisülés azonos elektróda távolsággal (b).
A nyilak az elektronok pályáját jelzik

Válasszuk a D_1 távolságot akkorának, hogy az adott nyomáson a 38a. ábra szerinti elrendezésben egy nagyfeszültség igényű, gátolt kisülés jöjjön létre! (Pl. 0,1 kPa nyomású héliumban D_1 legyen 0,5 mm.) Ekkor az elektronok a katód felületéből arra merőlegesen lépnek ki és igen rövid szakasz befutása után elérik az anódot. Ezen a rövid szakaszon kell az elektronoknak az önfenntartó kisüléshez szükséges ionizációt létrehozni. Az égési feszültség, ha $p \cdot d$ érték elég kicsi, a 3000–5000 V-ot is elérheti.

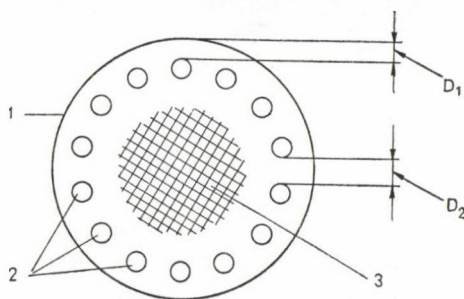
Alacsonyabb feszültségen jön létre a kisülés azonos nyomás és elektródatávolság mellett is, ha az anód mérete kicsi a katódfelülethez képest (38b. ábra). Ebben a megoldásban az elektronok hosszabb útszakasz megtétele után is eljuthatnak az anódhoz, az ionizáló ütközések száma nő, így kisebb feszültség is elegendő az önfenntartó kisüléshez szükséges ionizáció létrehozásához.

A 38a. és 38b. ábra két határesetnek fogható fel. A gátolt kisülés 3—5 kV feszültsége és a ködfénykisülés néhány száz voltos feszültsége között tetszőleges feszültség beállítható, ha ugyanebben az elrendezésben egy hálót használunk anódként (39. ábra). A nagyon sűrű háló a gátolt kisülésnek, a nagyon ritka, az alacsony feszültségű elrendezésnek felel meg.

A 39. ábrán látható elrendezésben az anódháló sűrűsége (D) a változtatható paraméter, amitől az égési feszültség függ. A 40. ábra mutatja az üreges katódú kisülést olyan elrendezésben, melyre a fenti elvet alkalmaztuk.



39. ábra. Ködfénykisülés szabályozható feszültséggel. 1. katód, 2. anódháló, 3. a kisülés fényes része, D_1 katód-anód távolság (megegyezik a 38. ábrán feltüntetett távolsággal), D_2 az anódhálóban a szálak távolsága egymástól, ezzel állítható be az égési feszültség



40. ábra. Üreges katódú kisülés szabályozható feszültséggel. Az ábra jelölései megegyeznek a 39. ábra jelöléseivel

A kisülés fényes részét itt egy üreges katód és anódháló veszi körül. Az ilyen elrendezést „HAC” (Hollow Anode-Cathode) kisülésnek neveztük el.

Miben fog várhatóan a HAC kisülés különbözni a hagyományos üreges katódú kisüléstől?

— Nagyobb lesz az égési feszültség. A feszültség nagysága az anódháló sűrűségével szabályozható.

— Megváltozik az elektronok átlagos energiája és energiaeioszlása, mert ugyanakkora nyomáson nagyobb feszültség gyorsítja az elektronokat. Az elektronok energiaeioszlási függvényében az energia felső határa (ha a katód felületéből kilépő elektronok energiáját elhanyagoljuk) az égési feszültségnek megfelelő energia. Az energiájukat elvesztett elektronok bármilyen irányba mozognak, könnyen eléri az anódot. A lassú elektronok tartózkodási ideje rövidebb a kisülésben, így részarányuk is kisebb.

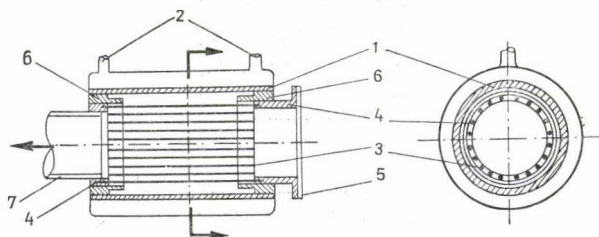
— A megváltozott energiaeioszlást a színeképnek is tükröznie kell. Intenzívebb lesz az ionszínkép és a semleges atomoknak azok a színeképvonalai, amelyeknek gerjesztéséhez nagyobb energiájú elektronok szükségesek.

— Mivel a kisülés kevésbé effektív (a fotoeffektus szerepe csökken az anód árnyékoló hatása miatt, a töltéshordozók nagyobb része rekombinálódik), ugyanakkor az adott áram létrejöttéhez szükséges a katódhoz érkező ionáram, az ionizáló ütközések száma megnövekszik.

A fentiekből feltételezhetjük, hogy a HAC kisülés elsősorban olyan lézereknél lesz hatásos, ahol a lézerátmenet felső nívójának gerjesztéséhez ionokra van szükség, illetve a lézerműködés egy ion színeképvonalán jön létre.

A felsorolt feltételezésekből kísérletileg sikerült bebizonyítani, hogy a feszültség szabályozható, a színeképvonal-intenzitások a várakozásnak megfelelőek és a lézerek hatásfoka és teljesítménye megnövekszik.

Az elektromos paraméterek és a kisülés színeképének vizsgálata céljából épített kisülési csövet a 41. ábrán láthatjuk.



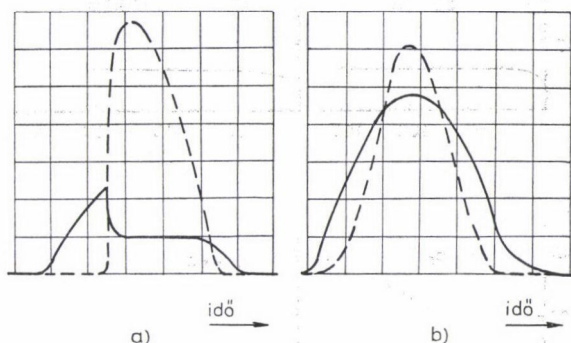
41. ábra. Üreges anód-katódú kisülési cső. 1. katód, 2. vízűtés, 3. anódszálak, 4. anód tartó gyűrűk, 5. kvarc ablak, 6. kerámia szigetelő, 7. csatlakozás a vákuumrendszerhez

A vízűtött üreges katód (1) rozsdamentes acélból készült. A katódüreg hossza 20 mm, átmérője 10 mm volt. Az anódok (3) 0,6 mm vastag wolframszálak voltak, melyeket réz tartógyűrűk (4) fogtak össze. Az anódszálak, illetve a tartógyűrűk által meghagyott szabad keresztmetszet 7 mm volt.

Feltételeztük, hogy az anódszálak közötti házagok nagymértékben meghatározzák a kisülés tulajdonságait, így két kisülési csövet építettünk 0,95, ill. 0,55 mm hézag-

gal. Összehasonlításként egy hasonló geometriájú üreges katódú csövet is építettünk, amelyikbe nem helyeztünk anódhálót.

A kisülés elektromos tulajdonságait hélium gázban vizsgáltuk együtasan egyenirányított váltóáramú kisülésben. Így az áram és feszültség időbeli lefutását oszcilloszkópon lehetett megfigyelni, ami egyrészt igen kényelmes volt, másrészt ki lehetett küszöbölni a lassú változások (felszabaduló gázszennyezés, hőmérsékletváltozás stb.) hatásait. A 42. ábrán jellegzetes oszcilloszkóp görbéket láthatunk.

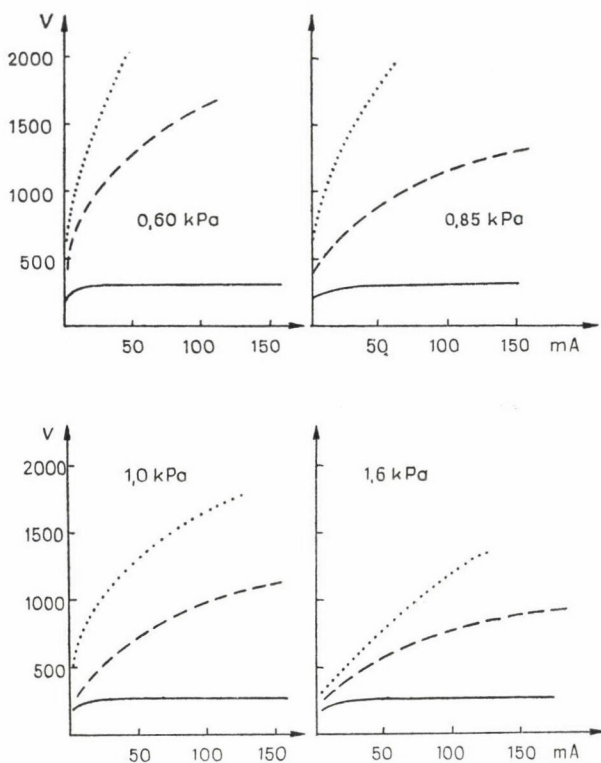


42. ábra. Oszcilloszkóp görbék üreges katódú (a) és HAC (b) kisülésről. Folytonos vonal: égési feszültség, szaggatott vonal: áram. Gáztöltés: hélium 0,6 kPa, időalap: 2 ms/osztás, áram 26,7 mA/osztás, feszültség: 377 V/osztás

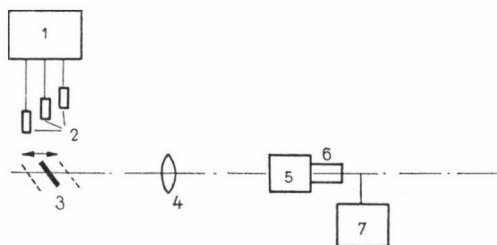
A 42. ábrán látható érdekes tapasztalat volt, hogy a HAC kisülésben az áram sokkal kisebb feszültség hatására megindul, míg az üreges katódú kisüléshez jelentős, az égési feszültségnél jóval nagyobb gyújtófeszültség volt szükséges. A jelenség oka valószínűleg az, hogy az anódszálak és katód között kezdetben megindul egy gyenge kisülés már kis feszültség hatására is. A HAC kisülésben az égési feszültség az áram növelésével folyamatosan nőtt, míg az üreges katódú kisülésben az ismert (a feszültség egy rövid emelkedő szakasz után már nem függ az áramtól) feszültség-áram összefüggés látható. Vizsgálatainkban a 2000 V-ot, ill. a 200 mA-t nem léptük túl, ebben a tartományban a kisülés stabil maradt, a nagyobb feszültség ellenére is.

Különböző anódszáltávolságú HAC kisülési csövekben mért áram-feszültség karakterisztikákat láthatunk a 43. ábrán, összehasonlítva az üreges katódú kisülésben mért függéssel.

Az a kísérleti tapasztalat, hogy az anódszálak közötti távolság nagymértékben befolyásolja az égési feszültséget, azt mutatja, hogy az anódszálak által körbezárt fényes kisülési résznek jelentős szerepe van az önfenntartó kisülés létrehozásában. Az ábráról az is látható, hogy az anódszálak közötti megfelelő távolság kiválasztásával az égési feszültséget széles tartományban szabadon megválaszthatjuk, függetlenül a gáznyomástól, az áramtól és a katódüreg átmérőjétől. 0,6 kPa alatt már igen kis (20 mA alatti) áramnál elérjük a 2000 V-ot, 2,2 kPa fölött a kisülés az anódszálak és a katódfal közötti részre korlátozódik, az égési feszültség megegyezik az üreges katódú kisülés égési feszültségével. (Ebben az átmérő-nyomás tartományban a hagyományos üreges katódú kisülési csőnél is sötét a katódüreg közepe.)



43. ábra. Áram-feszültség karakterisztikák HAC és üreges katódú kisülési csövekben mérve. Töltőgáz: hélium; pontozott vonal: HAC kisülés 0,55 mm hézaggal az anódcsálak között; szaggatott vonal: 0,95 mm hézag; folytonos vonal: üreges katódú kisülés



44. ábra. Kísérleti elrendezés az üreges katódú és HAC kisülés színeképének vizsgálata és összehasonlítása céljából. 1. vákuumrendszer, 2. kisülési csövek, 3. síktükör, 4. kvarclencse, 5. monokromátor, 6. detektor, 7. regisztráló

A kisülések optikai színeképét héliumban, argonban, hélium—kripton és hélium—neon elegyben vizsgáltuk. A kísérleti elrendezést a 44. ábra mutatja.

A kisülési csövek által sugárzott fény a síktükör (3) és kvarc lencse (4) segítségével jutott a monokromátorba (5). A kisülési csöveknek olyan elrendezést választottam, hogy a síktükör párhuzamos eltolásával az optikai úthossz megváltoztatása nélkül vizsgálhatók voltak az egyes kisülési csövek, és így a kisülésekben mért színeképvonalintenzitások közvetlenül össze lehetett hasonlítani.

A hélium színeképét 0,6 és 1,5 kPa közötti nyomástartományban vizsgáltuk. A HAC kisülésben a nagyobb feszültség hatására a teljes színekép intenzívebb mint üreges katódú kisülésben, különösen az ionvonalak intenzitása növekedett jelentős mértékben. Az 1. táblázatban néhány színeképvonal intenzitását hasonlítottuk össze. (A vizsgálatokat a két kisüléstípus összehasonlítása céljából végeztük, ezért sem a fotoelektron-sokszorozó spektrális érzékenységet, sem a monokromátor áteresztőképességének hullámhosszfüggését nem vettük figyelembe.)

1. TÁBLÁZAT

A hélium néhány színeképvonalának relatív intenzitása katódüregben és HAC kisülésben (távolság az anódrudak között 0,55 mm)

	nm	Üreges katód	HAC
		$P = 1 \text{ kPa}$ $I = 130 \text{ mA}$ $u = 270 \text{ V}$	$P = 1 \text{ kPa}$ $I = 120 \text{ mA}$ $u = 1880 \text{ V}$
		Relatív intenzitások	
	HeI 587,6	1400	3200
	HeI 501,6	180	550
	HeII 468,6	2,5	15
	HeI 388,8	280	340

A hélium—kripton elegy vizsgálatánál a kripton kataforézise jelentett nehézséget. A kisülésben a kripton színeképe fokozatosan gyengült, és hosszabb idő után el is tűnt. A HAC kisülésben csak nagyobb kriptonkoncentrációnál tudtuk a méréseket elvégezni. A 469,6 nm kripton-ion vonalat vizsgáltuk elsősorban, mert céljaink között szerepelt a kripton-ion lézer vizsgálata. Üreges katódú kisülésben 1,1 kPa He és 2,6 Pa Kr elegyében találtuk a maximális intenzitást. Ennek az intenzitásnak kétszeresét sikerült elérni a HAC kisülésben 1,3 kPa He és 28 Pa Kr elegyében.

Az argon színeképvonalainak intenzitását háromszoros égési feszültségű HAC kisülésben vizsgáltuk és hasonlítottuk össze az üreges katódú kisülésben talált intenzitásokkal. A megnövekedett feszültség olyan mértékű ionizációt eredményezett, hogy semleges atom színeképvonalainak intenzitása a HAC kisülésben lecsökkent. Ezzel szemben az ion színeképvonalai kb. négyszer intenzívebbek lettek, és megjelentek a kisülésben a kétszeresen ionizált argon színeképvonalai is. Néhány színeképvonal intenzitását a 2. táblázatban hasonlítottuk össze.

Megvizsgáltuk a He—Ne gázelegy színeképét is annak eldöntése céljából, hogy a He—Ne lézer 632,8 nm jól ismert vörös átmenete hogyan viselkedik az égési feszültség emelésére. (A He—Ne lézer gerjesztése He 2^1s metastabil atomok és neon

2. TÁBLÁZAT

Az argon néhány színekének relatív intenzitása katódüregben és HAC kisülésben

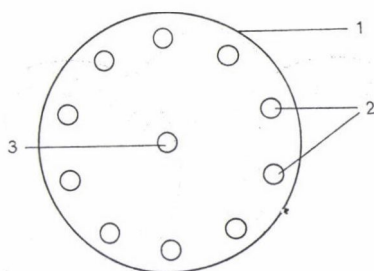
	nm	Katódüreg	HAC
		$P=0,4$ kPa $I=260$ mA $u=370$ V	$P=0,4$ kPa $I=260$ mA $u=1120$ V
		Relativ intenzitások	
ArI	425,2	7	2,5
ArI	415,9	15	10
ArII	514,5	0,5	3
ArII	488,0	14	40
ArII	372,9	1,5	6
ArIII	379,5	nem mutatható ki	0,5

atomok ütközésének eredménye és a lézer intenzitása üreges katódú kisülésben gyengébb mint pozitív oszlopban.) A HAC kisülésben általában intenzívebbek voltak a hélium és neon színeképvonalai, azok a neonvonalak azonban, amelyek gerjesztéséhez a hélium metastabil atomok szállítják az energiát, a hagyományos üreges katódú kisülésben voltak intenzívebbek, így a 632,8 nm vonal is.

A színeképvonalak intenzitásának vizsgálata azt mutatja, hogy a HAC kisülés valószínűleg kevésbé használható metastabil (elsősorban He 2^1s) atomok létrehozására. A megnövekedett intenzitású ionvonalak ezzel szemben valószínűsítették az üreges katódú lézerek nagyobb teljesítményét és hatásfokát. Az intenzív ionvonalak arra is utalnak, hogy a kisülésben a nagyenergiájú elektronok részaránya nagyobb.

Ezt a feltételezést támasztották alá tömegspektrométeres vizsgálataink is [70]. A méréseket neon kisülésben végeztük és az Ne^{++}/Ne^+ arányt hasonlítottuk össze üreges katódú és HAC kisülésben. Ez az arány a gáz nyomásától függően 2—5-ször nagyobbak adódott HAC kisülésben, alacsony nyomáson (1 kPa, 2000 V) a tömegspektrométerbe jutó ionáram 20%-a (!) kétszeresen ionizált neon volt. Ilyen értékeket folytonos kisülésben eddig nem lehetett elérni, ez a mérés azt mutatja, hogy a HAC kisülés ionforrásként is jól használható.

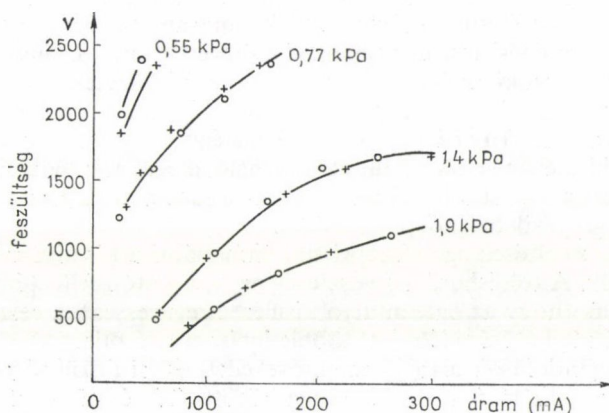
Az üreges katódú kisülésben számottevő elektromos térerősség csak a katód felületének közvetlen közelében van. Ennek alapján a HAC kisülést úgy képzelhetjük el, hogy a katód felületén igen nagy és általunk szabályozható térerősség gyorsítja az elektronokat egy gyakorlatilag semleges gáztérbe. A gerjesztés hasonló ahhoz, amikor a vákuumban elektronágyúval felgyorsított elektronokat csatolunk be a gáztérbe. Ilyenkor azonban az elektronáram korlátozott. A HAC kisülésben ez az elektronágyú mintegy be van építve a kisülésbe, és nincs akadálya az amper feletti áramoknak sem. A fentiek alapján jogos feltételezni, hogy a katód felületének közelében elhelyezett háló akkor is anódpotenciálra kerül, ha lebegőpotenciálra hagyjuk, és az anódot akárhol elhelyezhetjük a negatív fényben. Konstruktíós szempontból, különösen a nagy nyomású (1,5 kPa fölötti) tartományban célszerű lenne, ha a mm körüli átmérőjű anódrudak helyett, amelyek a kisülés jelentős részét letakarják, vékony drótból épített anódhálót használhatnánk. A vékony drótokon mind az elektromos csatlakozók elhelyezése, mind az esetenként jelentős áram elvezetése gondot okoz, ezért kísérletileg megvizsgáltuk a plazmapotenciálra hagyott háló hatását a 45. ábrán látható kisülési csövön.



45. ábra. Üreges anód-katódú kisülési cső.
1. katód, 2. anódháló, 3. központi anód

Az ábrán látható kisülési csővön kétféleképpen hoztunk létre kisülést; vagy a 2. háló szerepelt anódként és a 3. wolframszál lebegő potenciálon volt, vagy a 3. wolframszálat használtuk anódnak és a 2. hálót hagytuk plazmapotenciálon.

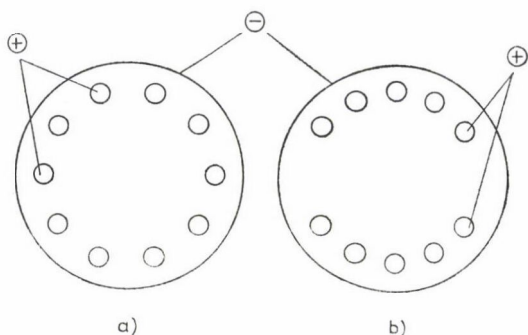
A héliumban mért áram—feszültség karakterisztikák gyakorlatilag azonosak voltak, csupán az egészen kis nyomású tartományban (0,5 kPa) adott az eredeti HAC kisülés kb. 10%-kal nagyobb feszültséget. A mért áram—feszültség karakterisztikákat a 46. ábrán láthatjuk.



46. ábra. A 45. ábrán látható kisülési cső áram—feszültség karakterisztikája héliumban. +. a rács lebegőpotenciálon, o. a rács az anód

Megvizsgáltuk, hogy az anódháló árnyékoló hatása miatt csökkent fotoeffektus jelentős szerepet játszik-e a HAC kisülés égési feszültségének kialakulásában. Kétféle anódelrendezést vizsgáltunk meg, azonos katódüregátmérő és anódszám mellett (47. ábra).

A 47. ábrán látható két kisülési cső anódelrendezésében az a lényeges különbség, hogy a (b) kisülési csőben két nagyobb, zavartalan katódfelületen jöhet létre kisülés. A negatív fényből a katód teljes felületére jutó fényintenzitás mindkét csőnél lényegé-



47. ábra. Belső anódot tartalmazó üreges katódú kisülési csövek. (a) HAC/kisülési cső, (b) a kisülés két nagyobb összefüggő katódfelülettel rendelkezik

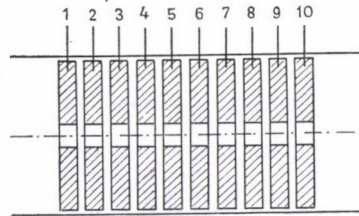
ben megegyezik az azonos anódszám és anódátmérő miatt. A fejezetben kifejtett megfontolások szerint az egyenletes anódelosztásnak jelentős szerepe van, és itt várható a nagyobb égési feszültség. Méréseink ezt a feltételezést teljes mértékben igazolták, a viszonylag nagy, összefüggő katód felületekkel rendelkező kisülési cső égési feszültsége megegyezett a hagyományos üreges katódú kisülési cső égési feszültségével.

A lecsökkent fotoeffektus — vizsgálataink tanulsága szerint — nem lehet fő oka a HAC kisülés nagy égési feszültségének. Az üreges katódú kisülés alacsony égési feszültsége akkor alakul ki, amikor az összefüggő katódfelületek nagyok. Amikor nagyobb feszültségre van szükségünk (pl. üreges katódú lézerek, erős ionszinkép, többszörösen ionizált atomok) a kisülést a katód felületén több, kis független részre kell osztani. A HAC kisülésben ez az osztás az anódháló, illetve az anódoszálak segítségével történik. Ugyanezt a hatást érjük el akkor is, ha a rács plazmapotenciálra van, ami gyakorlatilag megegyezik az anódpotenciállal.

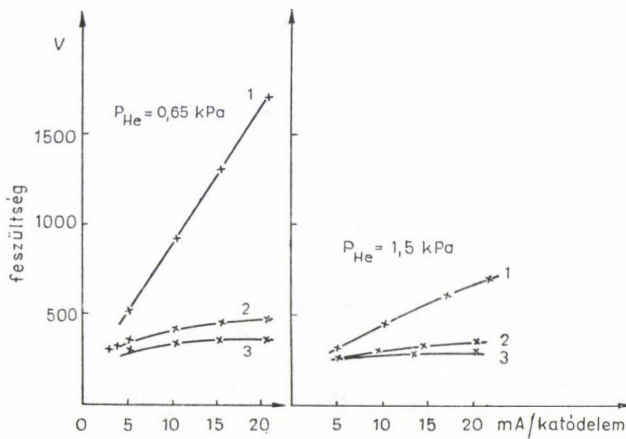
Az elektromos töltések egy része ki tud diffundálni a kis kisülési szakaszokból és rekombinálódik. A töltéshordozó veszteség nagy, a katód felületére el kell jutni a kívánt ionáramnak (hogy az önfenntartó kisülés létrejöhessen), a veszteséget a megnövekedett feszültség hatására létrejött többletionizáció pótolja.

A fenti megfontolások alapján megnövekedett égési feszültséget kell akkor is kapnunk, ha az anódháló és a katód felület közötti (39. és 40. ábrán D_1 -el jelzett) távolság nulla, azaz a kisülésben résztvevő katódfelület és az anódrendszer azonos hengerpaláston helyezkedik el. Ilyen kisülési csövet mutat a 48. ábra.

A kisülési cső fontosabb adatai: a fémgyűrűk rozsdamentes acélból készültek, vastagságuk 2 mm, a központi furat 5 mm, egymástól mért távolságuk 0,1 mm volt. Az elektródarendszert egy üvegköpenybe helyeztük el, minden elektródának független elektromos kivezetése volt, ami lehetővé tette, hogy különböző nagyságú, összefüggő katódfelületeket alakíthassunk ki. Ha az 1, 3, 5, 7 ... szegmenseket anódként, a 2, 4, 6 ... szegmenseket katódként kapcsoljuk, az egyes katódszakaszok hossza 2 mm. Ha az 1, 4, 7 ... szegmensek képezik a kisülési cső anódját és a 2—3, 5—6, ... szegmensek a katódokat, az egyes katódszakaszok 4 mm hosszúak. Bár ilyenkor van egy kis távolság a két katódszegmens között (pl. 2 és 3 között, amikor közös katódként szerepelnek), az így kialakított közös katódfelületeket összefüggőnek tekinthetjük, mivel



48. ábra. Kisülési cső változtatható méretű összefogó katódfelülettel. 1—10 — anódként és katódként is beköthető egymástól elszigetelt fémgyűrűk



49. ábra. Szegmentált üreges katódú kisülési cső (48. ábra) áram—feszültség karakterisztikája 1 — a katód szegmensek, 2 mm hosszúak; 2 — a szegmensek hossza 4 mm; 3—6 mm hosszú szegmensek

nincs közöttük anód, illetve olyan elem, ami a katód felszínén az elektromos tér kialakulását befolyásolná. A kisülési cső áram—feszültség karakterisztikáját hélium gázban vizsgáltuk a gáznyomás függvényében. Mérési eredményeinket a 49. ábrán láthatjuk.

A 49. ábrán láthatjuk, hogy a katódszegmensek osztásával valóban növelhető az égési feszültség. A 4 mm-es katóddaraboknál az égési feszültség még 50—100 V-tal nagyobb, mint az üreges katódú kisülés feszültsége. A katód szegmensek hosszát tovább növelve a kisülés átmegy a hagyományos üreges katódú kisülésbe. A jelenség, hasonlóan az előzőekben vizsgált jelenségekhez, nyomásfüggő, nagyobb nyomáson, illetve alacsonyabb ionizációs potenciálú gázban kisebb katódszegmens szükséges ugyanolyan feszültségnövekedés elérésére.

A HAC kisülések (és később a HAC lézerek) vizsgálatánál kellemes meglepetés volt a kisülések íveléssel szembeni stabilitása. Ha hagyományos üreges katódú kisülésben (vagy lézerben) próbáltunk olyan feltételeket létrehozni, amikor az égési feszültség nagy, a kisülés csak nagyon kis áramoknál volt stabil. (Az alacsony nyomású

tartományban az ívelési kritikus áram alacsony.) A HAC kisülések stabilitása magyarázható egyrészt az ilyen kisülések áram—feszültség karakterisztikájával, ezekben a kisülésekben növekvő áramhoz növekvő feszültség tartozik. Ha a katód egy részén a felületi áramsűrűség nő, az égési feszültség növekedése negatív visszacsatolást jelent. Ezzel szemben a hagyományos üreges katódú kisülések nagyáramú szakaszában az égési feszültség gyakorlatilag állandó, nem függ a katód felületén létrejövő áramsűrűség ingadozásaitól.

Az előző fejezetben láttuk, hogy a kisülésnek a katód felületén történő osztásával a kisülés stabilitását nagymértékben növelni lehet. A HAC kisülés ebből a szempontból felfogható úgy is, mint a kisülés nagyon finom osztása, ami még a nagyfeszültségű tartományban is kielégítő stabilitást ad.

3.2. Lézerek HAC kisülésben

A HAC kisülés elektromos karakterisztikája és a kisugárzott fény színeképének vizsgálata alapján egyértelművé vált, hogy az üreges katódú lézerek teljesítőképessége HAC kisülés alkalmazásával javítható. A feszültség növelése egyértelműen növeli a kisülésben az ionok koncentrációját, a legnagyobb teljesítmény és hatásfoknövekedés azoknál az átmeneteknél várható, ahol a gerjesztési mechanizmus töltéskicserélő ütközés nemesgáz ionok és fématomok között.

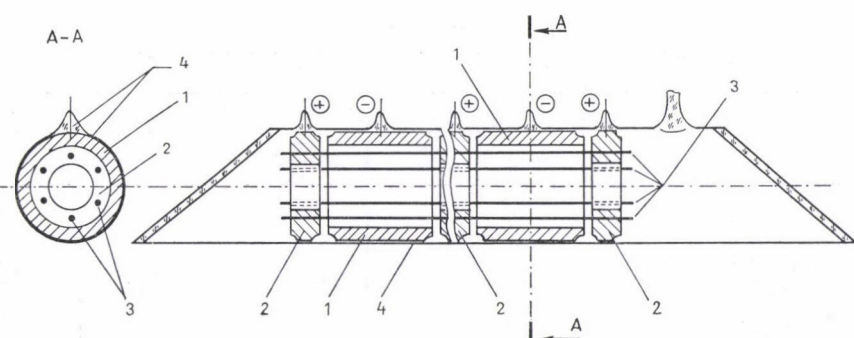
Metastabil nemesgázatomok előállítására a pozitív oszlopú kisülés alkalmasabb az üreges katódú kisülésnél. A nagyenergiájú elektronok nagyobb valószínűséggel ionizálnak, a lassú elektronok tovább csökkentik a metastabil atomok koncentrációját. A HAC kisülésben tovább növeltük a gyors elektronok energiáját, így olyan lézerátmeneten, amelynek gerjesztéséhez metastabil atomok szükségesek (pl. He—Ne lézer, Penning ionizáció), valószínűleg HAC kisülésben kisebb teljesítmények érhetők el mint üreges katódú kisülésben. Igen érdekes probléma lenne pl. a He—Cd lézer részletes vizsgálata, mert itt töltéskicserélő ütközéssel (pl. 537,8 nm) és Penning ionizációval (pl. 441,6 nm) végbemenő gerjesztés egyaránt lejátszódik.

A nemesgázelegyet tartalmazó lézereknél az alapállapotú ionok (melyek koncentrációja HAC kisülésben nagy) és metastabil atomok közötti reakció eredménye a szelektív gerjesztés. A színeképvonal-intenzitások vizsgálata alapján várható a teljesítmény növekedés, de mivel a gerjesztéshez metastabil atomok is szükségesek, várható volt, hogy az égési feszültséget esetleg csak korlátozott mértékben célszerű emelni.

A kísérleti vizsgálatokat túlnyomórészt nemesgázelegyet tartalmazó lézereken végeztük, mivel ezek építése a legegyszerűbb, és a kísérletek elvégzése is itt a legkönnyebb. A katódporlaszos és párologtatós lézerek vizsgálatában kezdeti, biztató eredményeink vannak.

3.2.1. Nemesgázelegyet tartalmazó lézerek

Üreges katódú lézerek építésével gyakran hagynak szabadon külső katódfelületet, ahol folyhat kisülés és feltételezik, hogy a kisülés túlnyomó része így is a katódüregben folyik. Ez a feltételezés nem túl nagy áramokig az üreges katódú effektus miatt elfogadható. Ha azonban HAC lézert építünk, az égési feszültség a katódüregben magas, ezért kizárólag olyan konstrukciók felelnek meg, ahol a külső katódfelü-



50. ábra. HAC lézer nemesgázelegyek vizsgálatára.

1 — katód szegmensek, 2 — anódtartó gyűrűk, 3 — anódszálak

let egyetlen pontján sem jöhet létre kisülés, különben a katódüregben, melynek égési feszültségét megnöveltük, nem folyik áram.

A vizsgálatok céljára épített lézer kisülési csővét az 50. ábrán láthatjuk.

A kisülési cső katódjait 4 db különálló alumínium cső (1) alkotta. A katódelemek belső átmérője 7 mm, hosszuk 100 mm volt. Az anódrendszer tartógyűrűkből (2) és 1,2 mm átmérőjű wolframszálakból állt. A 6 db wolframszál távolsága a katódfelület-től 0,5 mm, az egyes anódszálak közötti távolság 1,2 mm volt. Ebben a kisülési csőben He—Kr, He—Ar és (He)—Ne—Xe elegyben találtunk lézerműködést [71].

A gerjesztést együtasan egyenirányított váltóárammal, 12,5 Hz ismétlési frekvenciával hoztuk létre. A már ismertetett előnyök (oszilloszkópos megfigyelés stb.) mellett így lehet megoldani, hogy elérjük a kívánt áramértékeket anélkül, hogy a kisülési cső üvegeköpenye túlelegegdedne.

A He—Kr lézerben a legnagyobb lézerteljesítményt (18 mW) 1,5 kPa He és 10 Pa nyomású kripton elegyében találtuk. Az optimális nyomás ennél valószínűleg nagyobb (az üreges katódú kisülésben mért adatok alapján), de ekkor a vizsgált 3 A körüli áramnál a kisülés még nem tölti ki az anódszálak által bezárt térfogatot.

A hasonló geometriájú üreges katódú és HAC lézerben elért teljesítmények áramfüggését összehasonlítva láthatjuk az 51. ábrán.

Az ábrán látható, hogy a lézer küszöbárama kb. negyede a hasonló körülmények között működő üreges katódú lézer küszöbáramának, a lézerteljesítmény gyorsan növekszik és az üreges katódú lézer áramküszöbe alatt elérhető lézerteljesítmény (18 mW, nagyobb áteresztésű tükrökkel) minden eddigi teljesítményértéknél nagyobb volt.

Ugyanabban a lézercsőben vizsgálatokat végeztünk He—Ar gázelegyben is. Az argon-ion 476,5 nm színképvonalán 4 mW lézerteljesítményt értünk el. (Az osztott kisülésű üreges katódú kisülési csőben, ahol ezt a folytonos lézerátmenetet felfedeztük, a lézer teljesítménye 30 μ W volt.)

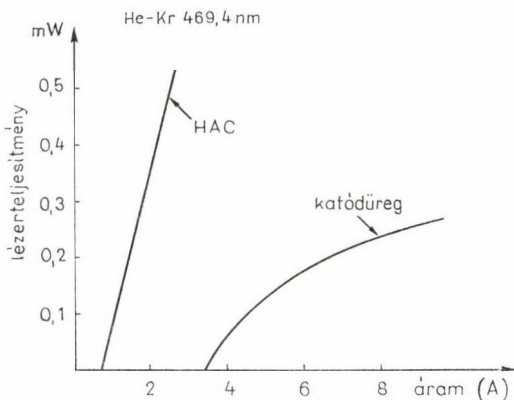
Az üreges katódú és üreges anód-katódú lézerek főbb működési paramétereit a 3. táblázatban foglaltuk össze.

A táblázatból látható, hogy mind He—Kr elegyben, mind He—Ar elegyben elért lézerteljesítmény nagyobb, ugyanakkor alacsonyabb áram szükséges a lézerek üzemeléséhez, és a lézerek hatásfoka is lényegesen jobb HAC lézerben mint a hagyományos üreges katódú lézerben.

3. TÁBLÁZAT

Az üreges katódú és HAC lézerek főbb működési adatai

	He—Kr 469,4 nm		He—Ar 476,5 nm	
	üreges katód	HAC	üreges katód	HAC
Katódüreg átmérő (mm)	7	7	3	7
Aktív hossz (cm)	51	40	54	40
Optimális Kr, Ar nyomás (Pa)	6,5	10	110	120
He nyomás (kPa)	1,5	1,7	3,2	1,4
Küszöbáram (A)	3	0,65	5,5	1,3
Maximális áram	10	3,2	8,2	3
Égési feszültség (V)				
(maximális áramnál)	350	880	310	850
Lézerteljesítmény (μ W)				
maximális áramnál és nagy reflexiójú tükrökkel)	300	600	30	120



51. ábra. A He—Kr lézer (469,4 nm) teljesítményének áramfüggése 7 mm átmérőjű üreges katódú kisülésben és HAC kisülésben

Ugyanebben a kisülési csőben sikerült folytonos lézerműködést elérnünk a Xe-non-ion, Jánossy M. [30] által megjósolt 531,4 és 486,3 nm színképvonalain. A lézer optimális nyomásadatai: 6 Pa Xe, 0,5 kPa Ne, 0,9 kPa He. Az 531,4 nm átmenet küszöbárama 3,3 A, az égési feszültség ekkor 700 V. A 486,3 nm átmenet küszöbárama 4,8 A, 700 V égési feszültség mellett. A lézerteljesítmény 0,1 mW volt.

A lézerműködés elérhető 1 kPa Ne és 5–6 Pa Xe elegyében is, de hélium—xenon elegyben nem találtunk erősítést. Ezek a tapasztalatok alátámasztják azt a feltételezést, hogy az átmenetek felső nivóit gerjesztő folyamat metastabil Ne atomok és Xe ionok reakciója. Vizsgálatainkat hasonló elrendezésű 1,6 m aktív szakaszú lézerben folytattuk [72]. A kisülési cső konstrukcióján a megnövelt aktív hosszön kívül lényeges változás nem volt. A kisülési csőben az előző csőnél leírt nyomáson nem optimalizált

kicsatoló tükörrel 11 A áram, 870 V égési feszültség mellett 100 mW fölötti lézerteljesítményt értünk el.

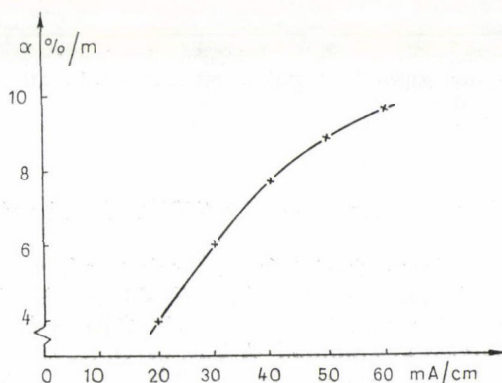
Nagyszámú új átmeneten találtunk lézerműködést He—Kr és He—Ar elegyben. Ezek közül kripton 651,0 nm, az Ar-ion 686,1 nm és 648,3 nm vonalain elelőtt nem hoztak létre lézerműködést. A Kr-ion 512,6, 453,3, 438,7, 431,8 nm vonalain impulzus üzemi pozitív oszlopú kisülésben *Dana és Laures* [29] előzőleg észlelt már lézerműködést. A pozitív oszlopú impulzuskisülésben nemesgázelegyben eddig talált valamennyi lézérátmeneten sikerült HAC kisülésben folytonos lézerműködést létrehozni, ami arra utal, hogy azok a lézérátmenetek, amelyek gerjesztéséhez az impulzus üzemi pozitív oszlopban létrehozható nagy energiájú elektronok szükségesek, folytonos lézerműködést adhatnak HAC kisülésben — ha ezt az élettartamviszonyok lehetővé teszik. Az Ar-ion 457,9 és 454,5 nm átmenetein először hoztunk létre lézerműködést üreges katódú He—Ar kisülésben.

A Kr-ion 431,8 nm színeképvonalának felső nívója ($6s^4 P_{5/2}$) megegyezik a 469,4 nm, elsőként talált lézérátmenet felső nívójával. Szimultán működésnél a kék (469,4 nm) lézervonal kb. 150-szer erősebb az ibolya lézervonalánál. A közös felső nívó miatt várható, hogy a kék lézérátmeneten a veszteséget szelektíven megnöveljük, az ibolya lézervonal megerősödik. A lézer rezonátorába helyezett planparalel kvarc-lemez finom beállításával sikerült megszüntetni a kék vonalon a lézerműködést és 20—30 mW lézerteljesítményt értünk el az ibolya átmeneten [73].

A lézerrezonátorba helyezett planparalel lemez elforgatásával létrehozható veszteség ismert módszer a lézer erősítésének mérésére. 20 mA/cm hosszegységre jutó áramnál a kék lézervonal erősítése 4,5 %/m, az ibolya lézervonal erősítése 2,5 %/m-nek adódott.

A hosszegységre jutó áram függvényében a lézer 469,4 nm vonalának erősítését az 52. ábrán láthatjuk.

Az új lézérátmenetek felfedezése, a 100 mW körüli lézerteljesítmény és a 10 %/m erősítés meggyőzően mutatják, hogy a változtatható feszültség új lehetőségeket tár fel az üreges katódú lézerek kutatásában, és az elért teljesítményadatok gyakorlati szempontból is érdekessé tehetik ezt a kisülés típust.



52. ábra. A 469,4 nm lézérátmenet erősítése a hosszegységre jutó áram függvényében.

$P_{He} = 1,7$ kPa, $P_{Kr} = 7$ Pa

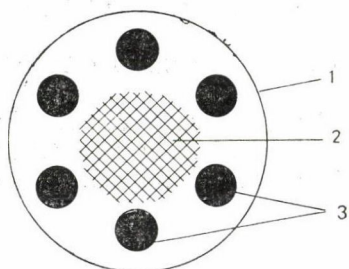
3.2.2. Vizsgálatok katódporlásos fémgőzlézereken HAC kisülésben

Mivel a katódporlásos lézerek konstrukciós szempontból egyszerűbbek a fém-elpárologatásos lézerekénél, elsősorban ilyen lézereken végeztünk vizsgálatot. A hagyományos katódüreges lézerekénél 2 mm körüli katódüregátmérőt használtak, mivel a porlott fém koncentrációja a katódfal közelében a legnagyobb, és így a szűk átmérőben próbálták megközelíteni az optimális fémgőzkoncentrációt a kisülésben.

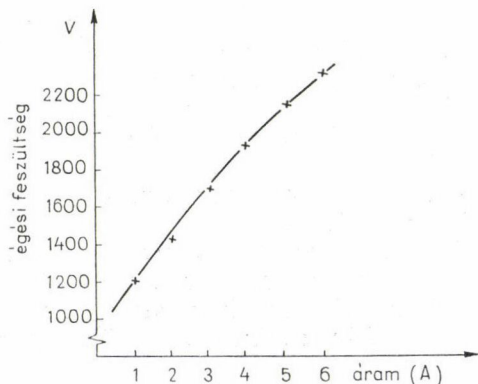
Méréseinkben nem volt mód ilyen szűk átmérőjű HAC lézer építésére és problematikusnak tűnt, vajon a cm körüli átmérőben el lehet-e érni a szükséges fémgőzkoncentrációt.

A Ne—Al lézer vizsgálatát a 3.2.1. pontban leírt (50. ábra) kisülési csövön végeztük [74]. A kisülési cső méretarányos keresztmetszete (53. ábra) érzékelteti, hogy a fémgőznek jelentős távolságot kellett megtenni, amíg a katódüreg közepébe eljutott.

Mivel az Al-ion lézer neon kisülésben működik, megvizsgáltuk a kisülési cső áram—feszültség karakterisztikáját 0,18 kPa nyomású neon gázban. Az 54. ábrán a várakozásnak megfelelően az égési feszültség sokszorosa a hagyományos üreges



53. ábra. HAC lézer méretarányos keresztmetszete (10:1 arányú nagyítás). 1. katód, 2. anódszálak, 3. a kisülés fényes része



54. ábra. Az 53. ábrán látható kisülési cső feszültségének áramfüggése 0,18 kPa nyomású Ne gázban

katódú kisülésnek, és nem okozott gondot 2000 V feletti égési feszültség elérése sem.

Az 54. ábrán látható áram—feszültség karakterisztika jelentősen különbözik a néhány kPa nyomású héliumban mért görbétől (l. 43. ábra). Kisnyomású neonban az áram növelésére a feszültség lineárisan növekszik. Előző méréseinkben a feszültség mindig kevésbé növekedett az árammal. A jelenség valószínű magyarázata az a tapasztalati tény, hogy fémgőzt tartalmazó nemesgázban az égési feszültség mindig magasabb a tiszta nemesgázban mért értékeknél. Itt az áram növelésével az alumínium koncentrációja fokozatosan növekszik, a növekvő fémgőzkoncentráció többletfeszültséget eredményez.

Lézerműködést kaptunk az Al-ion 692,0, 704,2 és 747,1 nm hullámhosszú átmenetein. A méréseket 2,5 Pa argon és 0,1—0,2 kPa neon elegyében végeztük. A kismennyiségű argon kb. 10%-kal csökkentette a lézer küszöbáramát (növelte a katódporlás hatásfokát). A lézer küszöbadatait a 4. táblázatban foglaltuk össze.

4. TÁBLÁZAT

HAC Al-ion lézer küszöbadatai

Hullámhossz (nm)	Küszöbáram (A)	Feszültség (V)	Opt. neon nyomás (kPa)
692,0	5	2180	0,18
704,2	2,8	2350	0,12
747,1	5,2	2230	0,18

(Érdeemes a lézer küszöbáramát összehasonlítani *Schuebel* [58] 2 mm széles, felhasított üreges katódú lézerben mért adataival; a 692,0 nm átmenet küszöbárama 15 A, a 704,2 nm átmenet küszöbárama 8 A volt.)

A meglepően alacsony küszöbáramok — különösen ha figyelembe vesszük a nagy (7 mm-es) katódüregátmérőt — egyértelműen mutatják az üreges anód-katódú lézerek előnyeit a hagyományos üreges katódú lézerekkel szemben.

Az üreges katódú réz lézer vizsgálatához olyan konstrukciót alakítottunk ki, hogy kisebb katódüreg átmérőben vizsgálhassuk a lézerműködést.

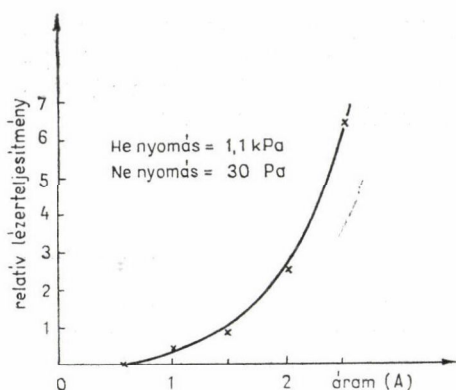
A katódüreg hosszát és átmérőjét csökkentettük, anódnak egy 0,1 mm falvastagságú perforált nikkelt csövet használtunk. A főbb geometriai méretek: katódüreg átmérője 4,5 mm, aktív hossz 190 mm, a szabad optikai keresztmetszet átmérője 3,4 mm. Az anódcső falába 1,1 mm átmérőjű lyukak voltak fúrva, a letakart és szabad katódfelület aránya 2/3 volt. A vékonyfalú anódcső használata lehetővé tette a katódüreg átmérőjének jelentős csökkentését (7-ről 4,5 mm-re), anélkül, hogy az anód által közrezárt hasznos átmérő változott volna.

A kisülést részben együtasan egyenirányított váltóárammal, 12,5 Hz ismétlődési frekvencia mellett, részben hasonló alakú egyes impulzusokkal hoztuk létre. Az égési feszültség áramfüggése hasonló lefutású a Ne—Al lézerben mért görbéhez. Az 55. ábrán egyszeri impulzussal felvett áram-feszültség karakterisztikát mutatunk be.

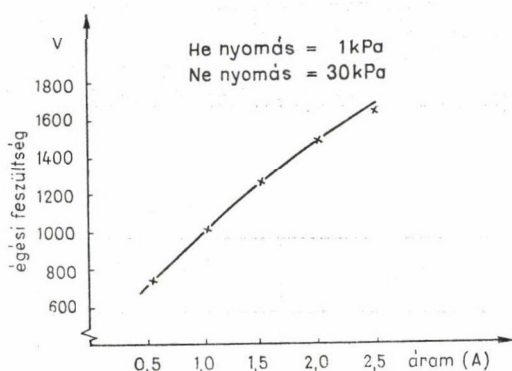
A 12,5 Hz gerjesztésnél a feszültségértékek kb. 10%-kal magasabbak, ami szépen mutatja a réz koncentrációjának növekedését az ismétlődési frekvencia növelésével.

Lézerműködést 740,4 és 789,6 nm között hat átmeneten sikerült létrehozni 0,7 és 1,5 kPa közötti héliumnyomáson, az optimális nyomás 1 kPa volt. A kismennyiségű (30 Pa) neon hozzáadása a küszöbáramot kb. 30%-kal csökkentette. (A He—Cu lézer felfedezésekor [49] 50 cm hosszú, 1,5 mm átmérőjű katódüregben is csak a 780,8 nm vonalon észleltünk lézerműködést.) A legerősebb, 780,8 nm lézervonal teljesítményének áramfüggését az 56. ábrán láthatjuk.

Nem optimalizált, 1 % áteresztésű tükörrel, 2,4 A áramnál 30 mW kicsatolt lézer-teljesítményt értünk el, egyes impulzusokkal gerjesztve a lézert. Alacsonyabb áramnál (1,1 A) összehasonlítottuk a 12,5 Hz-cel és az egyszeres impulzusokkal elérhető lézer-teljesítményt. Amíg 12,5 Hz-es gerjesztéssel 7 mW, az egyszeri impulzusokkal csak 3 mW teljesítményt értünk el. Ez a mérés azt mutatja, hogy a réz koncentrációja a ki-



55. ábra. A He—Cu katódporlósos HAC lézer égési feszültsége a kisülés áramának függvényében



56. ábra. A He—Cu lézer (780,8 nm) teljesítményének áramfüggése

sülésben alacsonyabb az optimálisnál. (Ez a probléma a hasonló üreges katódú lézereknel sincs tisztázva.)

Az 5. táblázatban összehasonlítottuk a HAC lézerben elért áramküszöbököt a 2 mm átmérőjű üreges katódú lézer [50—51] áramküszöb adataival.

5. TÁBLÁZAT

A He—Cu ion lézer infravörös vonalainak küszöbárama HAC és üreges katódú lézerben

nm	Küszöbáram (A)	
	HAC (4,5 mm átmérő)	Katódüreg (2×6 mm)
740,4	1,3	3,1
766,5	1,3	5,2
773,9	1,6	5,3
780,8	0,6	1,3
782,6	1,1	2,4
798,6	1,5	5,7

A gerjesztéshez 8 ms hosszúságú egyszeres impulzusokat használtunk. 12,5 Hz impulzusokkal létrehozott kisülésben a 780,8 nm átmenet küszöbárama 0,4 A volt. Ez az érték kevesebb mint egyharmada a katódporlósos lézerek irodalomban ismert legkisebb áramküszöbének.

A HAC lézerek teljesítmény és lézereküszöb adatai összehasonlítva a hagyományos katódporlósos lézerek hasonló adataival, rendkívül kedvezőek. Nem tisztázott azonban, hogy az alacsony lézereküszöb a HAC kisülés hatásosabb gerjesztésének, vagy a katód falának ütköző nagyenergiájú ionok hatására bekövetkező nagyobb mértékű katódporlás eredménye. Az eddig ismert égési feszültség változtatására végbemenő katódporlás hatásfokának változását úgy vizsgálták, hogy a gáznyomás csökkentésével növelték az égési feszültséget — erre volt mód. Érdekes lenne megvizsgálni, hogy állandó nyomáson hogyan változik a katódporlás hatásfoka az égési feszültség növelésével.

3.2.3. Párolgatódos HAC lézerek

A HAC lézerekről kapott képünk alapján itt várható a legnagyobb hatásfok és teljesítmény növekedés a hagyományos üreges katódú lézerekhez képest. A gerjesztési mechanizmus a legtöbb esetben töltéskicsérélő ütközés, az optimális fémgőznyomás a kályha hőmérsékletével beállítható. Ugyanekkor itt jelentkezik a legtöbb konstrukciós probléma, melyek nagy része ma még nincs megoldva.

Jelenleg csak néhány előzetes eredményről tudunk beszámolni, ezek azonban igazolni látszanak az ilyen lézerekkel szemben támasztott várakozásainkat.

Vizsgálatokat végeztünk a He—I^+ és He—Cd^+ lézereken [75, 76]. A kisülési csövek a He—Kr lézer vizsgálatánál alkalmazott HAC lézerhez hasonlóak voltak, az elektródákat rozsdamentes acélból készítettük. Az elektródák, főleg a He—I^+ lézerben a nagyenergiájú ionbombázás hatására erősen korródeálódtak. További problémát jelent a fémgőz egyenetlen eloszlása a kisülésben. Ahol a kisülésben fémgőz van jelen, az égési feszültség tovább növekszik, az áram túlnyomó része a kisülési cső fémgőzmentes részén folyt. A fémgőzt a kisülési térben a 24. ábrán bemutatott módon próbáltuk megtartani, de ennek ellenére kismennyiségű fémgőz lerakódott a Brewster ablakokon. Problémát okoz az ablakvédő pozitív oszlop és a HAC kisülés megfelelő elválasztása is.

Mindezek ellenére a He—I^+ lézerben az 576,1 és 612,7 nm átmeneteken lézerműködést értünk el, a lézer küszöbárama 500 mA volt. A He—Cd^+ lézerben az 537,8 és 533,8 nm vonalakon kaptunk lézerműködést. Nem sikerült lézerműködést létrehozni a maximális (1 A) áramértékig a Cd-ion 441,6 nm színekponton, ez arra enged következtetni, hogy a Penning ionizációval gerjesztett folyamatok létrehozására a HAC kisülés kevésbé alkalmas. Az 537,8 nm lézerátmenet küszöbárama 200 mA (!) volt. Ez a legalacsonyabb áramküszöb, amit eddig üreges katódú lézerben sikerült elérni. A lézerkonstrukció javításával, ha a fémgőz egyenletes eloszlását sikerül biztosítani, valószínűnek látszik a 100 mA körüli küszöbáram, és a néhány száz milli-ampereken működő lézer. Ilyen kis áramnál már a katód porlásából eredő problémák (gázmelegedés, rövidzárlat stb.) valószínűleg elhanyagolhatóak.

ÖSSZEFOGLALÁS

Az üreges katódú lézerek kutatásának kétféle, egymástól lényegében elválaszthatatlan célkitűzése különböztethető meg.

Az egyik a praktikus szempont. Az olcsó, közepes teljesítményű kék, zöld és ultraibolya lézerekre nagy szükség lenne, itt az üreges katódú lézerek hézagpótló szerepet töltenének be. A megfelelő lézerkonstrukció kialakításához azonban számos fizikai (elsősorban gázkisülési, felületfizikai és lézerfizikai) problémát is meg kell még oldani.

Megközelíthetjük a problémát tudományos oldalról is. A lézerek gerjesztési mechanizmusának vizsgálata, új lézerátmenetek felfedezése, a lézerek teljesítményének és hatásfokának növelése, a folytonos lézerek hullámhossztartományának kiterjesztése, mind izgalmas tudományos feladatok. A precíz, megbízható mérések megvalósításához azonban elengedhetetlen a megfelelő lézerkonstrukció kialakítása, a stabil kisülés és a kívánt gáztisztaság biztosítása.

A dolgozat célja az üreges katódú lézerek céljára alkalmazott gázkisülések vizsgálata és továbbfejlesztése volt. A használható lézerkonstrukció kialakításának legfőbb akadályai a kisülés nem kielégítő stabilitása, az ívkisülés kialakulása viszonylag alacsony áramokon. Az ívelési küszöbjelenségek vizsgálata segítséget nyújthat az ívkisülés kialakulásának megértéséhez. A lézerműködést széles áramtartományban tudtuk tanulmányozni és a kísérletek új — elméletileg már megjósolt — folytonos lézerátmenet felfedezéséhez is elvezettek.

A dolgozat jelentős eredményének tartom, hogy olyan üreges katódú lézerkonstrukciókat sikerült kialakítani, amelyek lehetővé tették az eddigieknél megbízhatóbb, reprodukálható kísérletek elvégzését és elhárították az elvi akadályokat a gyakorlatban felhasználható üreges katódú lézerek építésének útjából is.

Az új típusú (HAC) kisülés ma még inkább tudományos szempontból jelentős. Itt a feladat az üreges katódú lézerek gerjesztési mechanizmusához jobban illeszkedő kisülés kidolgozása volt.

Jelentős eredménynek tartom, hogy elsőként sikerült olyan folytonos gázkisülést létrehozni, ahol az elektronok energiája a gáznyomástól függetlenül szabályozható. Sikerült megmutatni, hogy lehet és érdemes a hagyományos gázkisülési elrendezéseket lézercélokra tovább fejleszteni.

Ez a tény távolról is lehetővé teszi, hogy a lézerek egyedi gerjesztési mechanizmusához illesszük a gázkisülés paramétereit. Az eddig elért eredményeket új lézerátmenetek, a lézerek hatásfokának és teljesítményének növekedése jelzik. A szabályozható feszültségű kisülések nemzetközi fogadtatása is kedvezőnek mondható. Összefoglaló cikkek és lézeres kézikönyvek részletesen foglalkoznak ezzel a témával. A dolgozatban közölt eredmények nyomán hasonló kutatások folynak ma már Ausztriában, Bulgáriában, Lengyelországban, a Nyugat-Berlini Műszaki Egyetemen és két japán egyetemen is (Seikei, Ibaraki). Amerikai kezdeményezésre közös kutatásokat tervezünk az arizonai Optical Science Center-rel.

A dolgozatban közölt problémák vizsgálata nem tekinthető befejezettnek. A felfedezett jelenségek kvantitatív értelmezése, a lézerkonstrukciók további tökéletesítése, a felmerült technikai problémák egyetlen kisülési csőben történő komplex megoldása — mind megoldásra váró feladat. Ugyanakkor látszik a lehetősége az egyszerű, olcsó, kék, ill. zöld fényt sugárzó lézer építésének. Elérhetőnek tűnik a nemesgáz ionlézerek teljesítményével vetekedő üreges katódú lézer építése, és a folytonos üzemű lézerek hullámhossztartományának a kiterjesztése a vákuum ultraibolya színek tartományába.

A dolgozatban elért új tudományos eredményeket a következő nyolc pontban foglalom össze:

1. Az ívkisülésbe történő átmenet vizsgálatára új típusú üreges katódú kisülési csövet terveztem, ahol a katód elein, csúcsain nem jöhet létre kisülés.

2. Megállapítottam, hogy az ívkisülés kialakulása egy aránylag éles „ívelési küszöbáram” környékén megy végbe, és ez az áramérték függ a gáz összetételétől és nyomásától. Megállapítottam, hogy van egy nyomás, ill. nyomás tartomány, ahol az ívelési küszöbáram maximális. Kimértem a küszöbáram nyomásfüggését héliumban, argonban, hélium—kripton és hélium—neon gázelegyenben.

3. Különböző hosszúságú üreges katódú kisülések vizsgálata alapján megállapítottam, hogy az ívelési küszöbáram széles határok között független a katód felületi áramsűrűségétől.

4. Az ívelési küszöbjelenségek vizsgálatából nyert eredmények alapján üreges katódú lézereket terveztem, ahol az ívelési küszöbáram többszöröse az előző kisülési csövekben talált értékeknek, lehetővé vált az egyes lézerkonstrukciók ívelési szempontból történő minősítése, a He—Kr⁺ lézer vizsgálata széles nyomás és áramtartományban és — az elméleti alapon megjósolt — új folytonos lézerátmenet (Ar⁺ 476,5 nm) felfedezése.

5. Új típusú gázkisülést (HAC) dolgoztam ki, ahol a kisülési cső égési feszültsége — függetlenül a katódüreg átmérőjétől, a gáznyomástól és a kisülés áramától — szabadon szabályozható az üreges katódú kisülés 200—400 V-os égési feszültségétől többeszer voltig is.

6. A HAC kisülés színeképének vizsgálatával kimutattam, hogy a kisülésben — a megnövelt elektronenergiák hatására — intenzívebb az ionszínkép, és az üreges katódú lézereknél jelentős teljesítmény és hatásfok növekedés várható a HAC kisülés alkalmazásától.

7. Megállapítottam, hogy a HAC kisülésben a többszörösen ionizált atomok részaránya az ionizált atomok között többszöröse a hagyományos kisülésben elérhető aránynak.

8. Lézereket terveztem a HAC kisülés alkalmazásával. Ezekben a lézerekben nemesgázelegyenben az eddig elért teljesítmények közel tízszeresét lehetett elérni és nagyszámú új — elméletileg megjósolt — lézerátmenetet sikerült felfedezni. Mind a katódporlasztásos, mind a fém elpárologtatásával működő lézerekben a hagyományos, hasonló lézerek küszöbáramánál 3—5-ször kisebb áramértékeknél indult meg a lézerműködés.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A dolgozatban összefoglalt munkák a MTA KFKI Szilárdtestfizikai Kutató Intézetének Fizikai és Optikai Főosztályán OMFB támogatással folyó gázlézerkutatások egy részét képezik.

Szeretnék köszönetet mondani Dr. Kroó Norbertnek és Dr. Csillag Lászlónak támogatásukért és azért, hogy lehetővé tették számomra a dolgozat elkészítését. A Dr. Bergou Jánossal, Dr. Csillag Lászlóval és Dr. Jánossy Mihállyal közösen publikált eredmények a dolgozat jelentős részét képezik.

A munka során közösen vitattunk meg, úgyszólván minden fontos kérdést. Külön köszönöm mindhármuknak a kézirat gondos elolvasását és hasznos észrevételeiket.

A dolgozat lényegi részét érintő kérdésekről igen hasznos konzultációkat folytattam *Dr. Bakos Józseffel*, *Dr. Varga Péterrel* és *Dr. Farkas Győzővel* a KFKI főmunkatársaival, *Dr. Antal Kálmán*-nal és *Halász Ferenc*-cel az EIVRT kutatólaboratóriumának munkatársaival, *Dr. Fazekas Endrével* (BME) és *Dr. Török Tiborral* (ELTE).

Már az első üreges katódú lézer építésénél felhasználtuk Prof. *George J. Collins* (Colorado State University) tapasztalatait, majd a katódporlasztásos lézereken mért igen fontos kísérleti adatait is rendelkezésünkre bocsátotta. Prof. *Franz Howorka* (Leopold Franzens Universität, Innsbruck) érdeklődésével, tanácsaival, világos, érthető magyarázataival sokat segített, a mérések egy részét az Innsbrucki Egyetemen közösen végeztük. *Dr. Jerzy K. Mizeraczyk*-kal (Institute of Fluid-Flow Machines, Gdańsk) szintén végeztünk közös vizsgálatokat Gdańskban. Prof. *Shuzo Hattori*-val (Nagoya University) és Prof. *Kan-Ichi Fujii*-val (Ibaraki University) a fémgőzt tartalmazó kisülésekről, a nagyfeszültségű üreges katódú kisülés értelmezéséről és alkalmazhatóságáról, Prof. *Szergej I. Anyiszimov*-val (Landau Elm. Fizikai Kutató Intézet, Moszkva) az üreges katódú kisülések stabilizálásával kapcsolatos kérdésekről folytattam igen hasznos konzultációkat, melyeknek a dolgozat végleges kialakítása szempontjából is fontos szerepük volt.

A kísérleti berendezések elkészítéséért, hasznos észrevételeikért és a mérések elvégzéséhez nyújtott segítségükért köszönetet illeti *Tóth József*, *Császár György* és *Forgács Judit* technikusokat, valamint *Majorosi Antal* üvegtechnikust.

Végül, de nem utolsósorban köszönettel tartozom *Feleségemnek*, aki nemcsak eltűrte a dolgozat — éjjelre nyúló — írását, hanem ideális feltételeket is teremtett a dolgozat megírásához.

IRODALOM

1. C. S. Willett, Introduction to Gas Lasers: Population Inversion Mechanisms Pergamon, 1974 13 és 137 old.
2. V. S. Borodin, Yu. M. Kagan, Sov. Phys. Techn. Phys. 11, 13, 1966.
3. Gordon Francis, The Glow Discharge at Low Pressure. Handbuch der Physik, Vol. XXII. Springer, 1956. 53—208.
4. P. Gill, Charge transfer as a Laser Excitation Mechanism Thesis, Oxford University, 1975.
5. M. Pahl, Z. Naturforsch. 27a, 1812, 1972.
6. C. Popovici, E. Avram, I. Matescu, I. Moldvan, Proc. "Electrode Phenomena and Gas Discharges" Bukarest, 1974, p. 169.
7. P. F. Little, A. von Engel, Proc. Royal Soc., London A-224, 209, 1954.
8. K. Fujii, IEEE J. Quantum Electron. QE—15, 35, 1979.
9. H. Helm, F. Howorka, M. Pahl, Z. Naturforsch. 27a, 1417, 1972.
10. Y. Sugawara, Study on the cw Laser Oscillations in He—Cd and He—Zn in a Hollow Cathode Discharge. Thesis, Seikei University, Tokyo, 1975.
11. Rózsa K., Vizsgálatok a He—Kr gázelegy szinképén üreges katódú kisülésben. Egyetemi doktori értekezés. BME, Budapest, 1974.
12. K. Rózsa, Z. Naturforsch. 35a, 649—664, 1980.
13. P. Gill, Charge Transfer as a Laser Excitation Mechanism. Thesis, Oxford University, 1975.
14. K. Fujii, Japan J. Appl. Phys. 16, 1081, 1977.
15. I. Kuen, H. Störi, F. Howorka, megj. alatt;
16. F. Howorka, J. Chem. Phys. 68, 804, 1978.
17. E. K. Karabut, V. S. Michalevskii, V. F. Papakin, M. F. Sem, J. Techn. Phys. 39, 1923, 1969.
18. Y. Sugawara, Y. Tokiwa, Japan J. Appl. Phys. 9, 588, 1970.
19. W. K. Schuebel, IEEE J. Quantum Electron. QE—6, 547, 1970.
20. K. Rózsa, Design Principles of Hollow Cathode Lasers. Inv. lect. on Summer School of Quantum Electronics, Gdansk, 277—308, 1980.
21. I. Kuen, Untersuchungen zur Kinetik positiver und negativer Ionen in einer stationären Hohlkatodenladung, Thesis, Universität Innsbruck, 1979.
22. F. Howorka, I. Kuen, J. Chem. Phys. 70, 595, 1979.
23. I. Kuen, F. Howorka, R. N. Varney, Int. J. Mass. Spectrom. 38, 101, 1978.
24. I. Kuen, F. Howorka, J. Chem. Phys. 70, 758, 1979.
25. F. Howorka, W. Lindiger, M. Pahl, Int. J. Mass Spectrom. 12, 67, 1963.
26. J. Piper, C. E. Webb, J. Phys. D. Appl. Phys. 9, 588, 1970.
27. K. Fujii, T. Takashi, Y. Asami, IEEE J. Quantum Electron. QE 11, 111, 1975.

28. N. K. Vuchkov, M. G. Grozeva, N. V. Sabotinov, *Opt. Comm.* 27, 114, 1978.
29. L. Dana, P. Laures, *Proc. IEEE*, 53, 78, 1965.
30. Jánosy M., Vizsgálatok a két komponensű ion gázlézerek területéről. Kandidátusi értekezés, Budapest, 1974.
31. T. Goto, K. Nakamura, S. Hattori, *IEEE J. Quantum Electronics QE*—6, 159, 1970.
32. M. Jánosy, L. Csillag, K. Rózsa, T. Salamon, *Phys. Lett.* 47A, 411, 1974.
33. M. Jánosy, L. Csillag, K. Rózsa, T. Salamon, *Phys. Lett.* 46A, 379, 1974.
34. K. Rózsa, L. Csillag, M. Jánosy, T. Salamon, *KFKI*—73—39, *Kvantovaja Elektronika* 1, 953, 1974.
35. L. Csillag, C. Z. Nam, M. Jánosy, K. Rózsa, *Opt. Comm.* 21, 39, 1977.
36. Y. Sugawara, Y. Tokiwa, T. Iijima, *Japan. J. Appl. Phys.* 9, 1537, 1970.
37. G. J. Collins, *Cw Oscillation and Charge-exchange Excitation in the He—Zn laser*, Thesis, Yale University, 1970.
38. J. A. Piper, P. Gill, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 8, 127, 1975.
39. J. A. Piper, G. J. Collins, C.E. Webb, *Appl. Phys. Lett.* 21, 203, 1972.
40. J. A. Piper, *J. Phys. D: Appl. Phys. Lett.* 7, 323, 1974.
41. J. A. Piper, C. E. Webb, *Opt. Comm.* 13, 122, 1975.
42. J. A. Piper, C. E. Webb, *J. Phys. B.* 6, L—116, 1973.
43. M. G. Grozeva, N. V. Sabotinov, N. K. Vuchkov, *Opt. Comm.* 29, 339, 1979.
44. T. Shay, H. Kano, G. J. Collins, *Appl. Phys. Lett.* 26, 531, 1975.
45. G. J. Collins, R. C. Jensen, W. R. Bennett, Jr., *Appl. Phys. Lett.* 18, 282, 1972.
46. S. Chinen, S. Hattori, *J. Appl. Phys.* 48, 3603, 1977.
47. G. J. Collins, *J. Appl. Phys.* 44, 4622, 1973.
48. K. G. Hernqvist, *IEEE J. Quantum Electron, QE*—13, 64D, 1977.
49. L. Csillag, M. Jánosy, K. Rózsa, T. Salamon, *Phys. Lett.* 50A, 13, 1974.
50. J. R. McNeil, G. J. Collins, K. B. Persson, D. L. Franzen, *Appl. Phys. Lett.* 27, 595, 1975.
51. J. R. McNeil, G. J. Collins, K. B. Persson, D. L. Franzen, *Appl. Phys. Lett.* 28, 207, 1976.
52. K. G. Hernqvist, *IEEE J. Quantum Electron, QE*—13, 929, 1977.
53. H. J. Eichler, H. Koch, J. Salk, G. Shafer, *IEEE J. Quantum Electron QE*—13 1979.
54. W. J. Johnson, J. R. McNeil, G. J. Collins, K. B. Persson, *Appl. Phys. Lett.* 28, 101, 1976.
55. J. R. McNeil, W. L. Johnson, G. J. Collins, K. B. Persson, *Appl. Phys. Lett.* 29, 172, 1976.
56. R. D. Ried, J. R. McNeil, G. J. Collins, *Appl. Phys. Lett.* 29, 666, 1976.
57. D. C. Gerstenberger, R. D. Ried, G. J. Collins, *Appl. Phys. Lett.* 30, 466, 1977.
58. W. K. Shuebel, *Appl. Phys. Lett.* 30, 516, 1977.
59. J. A. Piper, D. F. Nelly, *Appl. Phys. Lett.* 33, 621, 1978.
60. J. A. Piper, *Use of Volatile Compounds for Operation of cw Metal Ion Lasers*, *SPIE Proc. Lasers* '78, 168, Florida, 1978.
61. H. Störi, megjelenés alatt.
62. T. Suzuki, *Japan Appl. Phys.* 7, 788, 1968.
63. K. Rózsa, T. Salamon, *Optics and Laser Techn.* 2, 151, 1970.
64. M. L. Oleson, A. V. Cooper, *Advances in Electronics and Electron Physics*, 24. Academic Press, p. 155.
65. M. Jánosy, *Phys. Lett.* 47A, 409, 1974.
66. R. G. Jensen, G. J. Collins, W. R. Bennett, Jr., *Appl. Phys. Lett.* 18, 50, 1971.
67. M. Jánosy, K. Rózsa, L. Csillag, *Le Trong Muu, Proc. of Optika* '80 p. 186—187, Budapest 1980.
68. M. Jánosy, L. Csillag, K. Rózsa, *Phys. Lett.* 63A, 84, 1977.
69. K. Rózsa, *KFKI*—1975—63.
70. K. Rózsa, I. Kuen, F. Howorka, W. Dobler, *Symp. on Atomic and Surface Phys.* p. 167—172, Maria Alm Salzburg 1980.
71. K. Rózsa, M. Jánosy, J. Bergou, L. Csillag, *Opt. Commun.* 23, 15, 1977.
72. M. Jánosy, K. Rózsa, L. Csillag, J. Bergou, *Phys. Lett.* 68A, 317, 1978.
73. K. Rózsa, M. Stefanova, M. Jánosy, *KFKI*—1979—11.
74. K. Rózsa, M. Jánosy, L. Csillag, J. Bergou, *Phys. Lett.* 63A, 231, 1977.
75. J. Mizeraczyk, J. Konieczka, J. Wasilewski, W. Urbanik, K. Rózsa, P. Telbizov, *Proc. of Ekon* '80. Poznan, p. 119—120, 1980.
76. J. Mizeraczyk, J. Konieczka, J. Wasilewski, K. Rózsa, *Proc. of Lasers* '80, New Orleans, megjelenés alatt.

A NEGATÍV ABSZOLÚT HŐMÉRSÉKLETEK NÉHÁNY SAJÁTSÁGA*

HORVÁTH MÁRTON

1. BEVEZETÉS

A negatív abszolút hőmérsékletű állapotok és rendszerek létezése alapvető feltételeinek lényeges elemeit már Ramsay [1], Hecht [2], Schöpf, Hans-Georg [3] és Falk-Jung [4] munkáiban megtalálhatjuk.

Anélkül, hogy eme alapelvek konformitásának értékelésére kitérnénk, a rendszerek néhány olyan területét vizsgáljuk meg, amellyel a korábbi zártág részben feloldódik.

Térjünk röviden vissza az első főtétel reverzibilis, kvázistatikus alakjára:

$$dU = Td_e S + X_i dy_i. \quad (1.1)$$

Az $y_i = \text{konst.}$ feltétellel a

$$\left(\frac{d_e S}{dU} \right)_{y_i} = \frac{1}{T} = f(n_i, \varepsilon_i), \quad n_i = N_i/N \quad (1.2)$$

kapcsolatot megnézzük a Boltzmann-összefüggés alapján. Ekkor

$$\left(\frac{d_e S}{dU} \right)_{y_i} = -k \frac{\sum \ln n_i dn_i}{\sum \varepsilon_i dn_i}. \quad (1.3)$$

$_e S$ -vel a környezeti, $_i S$ -vel a belső entrópiát jelöljük. Könnyen belátható, hogy 1.3 kifejezés $-\infty$ és $+\infty$ között bármilyen értékű lehet. A legegyszerűbb esetben két energiaszintet véve fel $\varepsilon_1 < \varepsilon_2$ és $d(n_1 + n_2) = 0$,

$$\left(\frac{d_e S}{dU} \right)_{y_i} = k \frac{-\ln(n_2/n_1)}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}. \quad (1.5)$$

A nevező a feltételből következően pozitív, a számláló pedig pozitív, ha $n_2 < n_1$ és negatív, ha $n_2 > n_1$. A tört értéke — azaz a hőmérséklet — tehát pozitív és negatív értékeket is felvehet, és ez kizárólag az energiaszintek benépesítésétől függ. Természetesen a rendszer stabilitásáról egyenleteink semmit sem mondanak.

Egy termodinamikai rendszerben tehát, amelynél a $\left(\frac{d_e S}{dU} \right)_{y_i}$, vagy az ezzel egyenértékű $\left(\frac{d_e S}{dH} \right)_{x_i}$ negatív értéket is felvesz, az abszolút hőmérséklet is negatívvá válik.

* Érkezett 1984. ápr. 25.

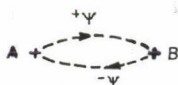
Ilyen rendszerek elméletileg követhetőek, fő tulajdonságaik felírhatóak, termodinamikájuk egyértelműen, ellentmondástól mentesen kidolgozható. Amint a mechanikai rendszer tárgyát képezi egy mechanikai rendszer mozgásának tárgyalása, és sajátságainak vizsgálata, éppúgy vizsgálhatók egy számos mechanikai rendszerből álló sokaság sajátságai függetlenül attól, hogy az ilyen rendszerek, vagy azok sokaságai a természetben — ismereteink szerint — egyáltalában előfordulnak vagy előfordulhatnak.

Negatív abszolút hőmérsékletű állapotokat azonban létre lehet hozni (Laser, Maser), vagy meg lehet figyelni (pl. egyes kémiai reakcióknál vagy radioaktív sugárzásnál).

Éppen ezért a továbbiakban nem azt tesszük kérdésessé, hogy van-e fizikai realizálása a negatív abszolút hőmérsékleteknek, hanem azt, hogy más energia kategóriába tartozik-e a pozitív és negatív abszolút hőmérsékletek tartományában a hőmérséklet eddig ismert kapcsolata a termodinamika alapvető potenciálfüggvényeivel?

Egy elvi probléma kezdetben felvetődik. Ha kvázistatikus reverzibilis úton próbálunk egyik tartományból átjutni a másikba, kísérletünk eredménytelen marad. Ha pl. a két tartományt Carnot-körfolyamattal próbáljuk összekötni, akkor, mivel T^+/T^- mindig negatív, vagyis a termodinamikai határfok nagyobb, mint egy, azaz a körfolyamat nem valódi. Így elvi lehetőség sincs olyan Carnot-körfolyamatok megvalósítására vagy elképzelésére, amelyek pozitív és negatív hőmérsékletek között játszódna le. Ennek az a következménye, hogy Carnot-ciklussal pozitív és negatív hőmérsékletek közti viszony nem definiálható, mivel a két tartomány között nincs biztosítva a kvázistatikus adiabatikus átmeneteknél.

Külön kiemeljük a reverzibilitás jelen dolgozatban használatos értelmezését. Mi reverzibilisnek nevezünk egy folyamatot akkor, ha egy rendszer az A állapotból egy (ψ) hatására a B állapotba jut, és onnan egy ellenkező $(-\psi)$ hatásra az eredeti állapotot éri el. E közben nem szükséges, hogy az átmeneti állapot bármelyik fázisában egyensúlyi helyzet legyen. Ez adott esetben azt is jelentheti, hogy az ilyen rever-



1. ábra

zibilis változást menet közben nem állíthatunk meg, és nem fordíthatunk vissza, a reverzibilis folyamat csak két meghatározott állapot között mehet végbe. Ezzel definiáltuk az adiabatikus reverzibilis ugrást, amely lehetőséget biztosít a két hőmérsékleti tartomány közötti átmenetre.

Miként ismert, a két tartomány érintkezése a $T = \pm \infty$ hőmérsékleten történik, vagyis az átmenet hőmérsékletugrással megy végbe. Ezt az átmenetet egyes kutatók [6] vizsgálatai másodrendű fázisátalakulásnak mutatják.

2. LINEÁRIS OSZCILLÁTOROK

Planck-féle oszcillátor

Ramsay [1] vizsgálta az oszcillátort a két hőmérsékleti tartományban. Az oszcillátornak az energiaszintjei legyenek rendre $(l + \frac{1}{2})\varepsilon$. Mivel az $1/2$ kvantumszám a hőmérsékleti tagban nem játszik szerepet — csak a nulla ponti energiában —, elhagyhatjuk. Így az állapot-összeg

$$Z = \sum_{-n}^{+n} e^{-l\mu\varepsilon} = \frac{\text{sh } (2n+1)\xi/2}{\text{sh } \xi/2}, \quad \left(\xi = \mu\varepsilon = \frac{\varepsilon}{kT} \right). \quad (2.1)$$

Az $l \rightarrow \pm n$ értékekkel az állapotösszeg mind a két hőmérsékleti tartományt felöleli.

A statisztika szokásos módszereivel:

A belső energia

$$U = \frac{\varepsilon}{2} [\text{cth } \xi/2 - (2n+1) \text{cth } (2n+1)\xi/2]. \quad (2.2)$$

A fajhő

$$c = k(\xi/2)^2 \left[\frac{1}{\text{sh}^2 \xi/2} - \frac{(2n+1)^2}{\text{sh}^2 (2n+1)\xi/2} \right]. \quad (2.3)$$

Az entrópia

$$S = k \left[\ln \frac{\text{sh } (2n+1)\xi/2}{\text{sh } \xi/2} + \frac{\xi}{2} (\text{cth } \xi/2 - (2n+1) \text{cth } (2n+1)\xi/2) \right]. \quad (2.4)$$

A fajhőnél láthatóan

$$c \rightarrow 0, \quad \text{ha } \xi \rightarrow \frac{\pm 0}{\pm \infty}, \quad \text{azaz } T \rightarrow \frac{\pm \infty}{\pm 0}.$$

$$\left(\frac{d_e S}{dU} \right)_{y_i} \text{ pedig } \rightarrow \pm \infty, \quad \text{ha } \xi \rightarrow \pm \infty.$$

Érdemes megjegyezni, hogy a fajhő $1/T^2$ -al tart a nullához, ha $T \rightarrow \pm \infty$. A fajhőnek ezt a tulajdonságát később felhasználjuk.

Fermi-féle oszcillátor

A Fermi-oszcillátornak csak két energiaszintje lehet, nulla vagy ε [5]. Ezért az állapotösszeg alakja egyszerű,

$$^+Z = 1 + e^{-\mu\varepsilon},$$

illetve a negatív hőmérsékleti tartományban

$$^-Z = 1 + e^{\mu\varepsilon},$$

vagyis

$$Z = ^+Z \cdot ^-Z = 4 \text{ch}^2 \xi/2. \quad (2.5)$$

Az ismert módszerrel:

A belső energia

$$U = -\varepsilon \operatorname{th} \xi/2. \quad (2.6)$$

A fajhő

$$c = 2k \left(\frac{\xi}{2} \right)^2 \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \xi/2}. \quad (2.7)$$

Az entrópia

$$S = 2k [\ln 2 \operatorname{ch} \xi/2 - \xi/2 \operatorname{th} \xi/2]. \quad (2.8)$$

Ha

$$\begin{array}{ccccccc} \xi/2 \rightarrow & -\infty & & -0 & & 1 & & 0 \\ & 0, & \text{akkor} & T \rightarrow \mp \infty, & \frac{U}{\varepsilon} \rightarrow & 0, & \frac{c}{k} \rightarrow 0, & \frac{S}{k} \rightarrow 2 \ln 2. \\ & +\infty & & +0 & & -1 & & 0 \end{array}$$

Könnyen kimutathatjuk, hogy a fajhő hasonlóan a Planck-oszcillátoréhoz ugyancsak $1/T^2$ szerint tart a nullához, ha $T \rightarrow \pm \infty$ -hez és a $\left(\frac{dS}{dU} \right)_{y_i} \rightarrow \pm \infty$, miközben $T \rightarrow \pm 0$ -hoz. Ugyanakkor egyik oszcillátor sem tesz eleget a nullapont közelében a $c = AT^3 + \gamma T$ törvénynek.

3. BETÖLTÉSI SZÁMOK

A statisztikai rendszerek a betöltési számokra az alábbiakat szolgáltatják g_i számú fáziscella esetén.

Maxwell—Boltzmann:

$$N_i = \frac{g_i}{e^{\alpha+1+\xi_i}}, \quad (3.1)$$

Bose—Einstein:

$$N_i = \frac{g_i}{e^{\alpha+\xi_i}-1}, \quad (3.2)$$

Fermi—Dirac:

$$N_i = \frac{g_i}{e^{\alpha+\xi_i}+1}. \quad (3.3)$$

Ha $\xi_i = \varepsilon_i/kT$ negatív értékeire is figyelemmel vagyunk, akkor ebben a tartományban a következő megállapításokat tehetjük:

- Az energiaszintek nagyságának növekedésével növekszenek a betöltési számok is.
- A Bose—Einstein statisztika csak akkor ad pozitív betöltési számot, ha $\alpha - \xi_i > 0$. (Ez a feltétel az esetek nagy részében teljesül.)
- A legnagyobb energiaszint elvileg is csak $\varepsilon_{i\max} = U/N$ lehet.
- A feles spinű részecskék minden megkötés nélkül eleget tesznek a statisztikának, míg az egész számú spinnel rendelkező részecskére vonatkozik a b) alatti megkötés.
- A c) alatti megkötést úgy is megfogalmazhatjuk, hogy csak energetikailag korlátozott rendszereknél lehetséges negatív hőmérsékletű állapot.

4. ENTRÓPIA A HŐMÉRSÉKLETI HATÁRON

A Planck-oszcillátornál az entrópia

$$S = k \left\{ \ln \frac{\text{sh} (2n+1) \xi/2}{\text{sh} \xi/2} + \frac{\xi}{2} [\text{cth} \xi/2 - (2n+1) \text{cth} (2n+1) \xi/2] \right\} \quad (4.1)$$

sorba fejthető, ha ξ igen kicsi. A $\xi = \varepsilon/kT$ nem pusztán azért lehet kicsi, mivel T igen nagy, hanem azért is, mert ε is igen kicsi ($\varepsilon \rightarrow 0$), vagyis az energia a klasszikus felfogás szerint folytonos.

A sorbafejtés szerint

$$\frac{S}{k} \rightarrow \ln (2n+1) \rightarrow \infty, \quad (4.2)$$

$$n \rightarrow \infty$$

Külön megfontolást érdemel, hogy a határátmenet feltételezi a $(2n+1) \cdot \varepsilon/2kT \rightarrow 0$. Ez esetben a hőmérséklet gyorsabban növekszik, mint a kvantumszám, azaz míg $\xi \sim 1/T$, addig $2n+1$ csak minden határon túl nő, de gyengébben, mint a T . Ebből a megfontolásból következik, hogy az entrópiagörbe Planck-oszcillátornál — közeledve a kvantáltságot folyamatossá tevő klasszikus szemlélethez — aszimptotikusan közelíti meg a $\xi=0$ tengelyt, és azt nem metszi, vagyis izentropikus, kvázistatikus úton az egyik hőmérsékleti tartományból a másikba átjutni nem lehet.

Ezzel szemben a Fermi-oszcillátoroknál az entrópia értéke a fenti feltételeknél

$$S/k = 2 \ln 2$$

minden esetben, vagyis az entrópia folytonos a $T \rightarrow \pm \infty$ átmeneteknél.

5. PARAMÁGNESES JELENSÉGEK

A paramágneses anyagok rövid áttekintésénél a mágneses nyomatékot és az adiabatikus mágnesezést vizsgáljuk. A kvantumfeltételek figyelembevételével a Langevin-egyenlet a következő alakot ölti: [6]

$$M/M_0 = \frac{2J+1}{2J} \text{cth} \frac{2J+1}{2J} g \mu_B \frac{H \mu_0}{kT} - \frac{1}{2J} \text{cth} \frac{1}{2J} g \mu_B \frac{H \mu_0}{kT}. \quad (5.1)$$

Itt g a Landé faktor,

J a teljes impulzus nyomaték kvantumszáma,

μ_B a Bohr-magneton,

H a külső mágneses térerősség,

μ_0 a vákuum permeabilitása,

M a mágneses nyomaték.

A telítési mágnesezés, azaz

$$M_0 = g J N \mu_B, \quad \text{ha } T \ll \text{ vagy } H \gg.$$

Szemléletesebb Feynman elektronra ($l=1/2$) felírt [8] egyenlete:

$$M = M_0 \text{th} \frac{g \mu_B B}{2 kT}. \quad (5.2)$$

Itt B a mágneses indukcióvektor abszolút értéke. Gyenge tereknél

$$M = \frac{1}{3} g^2 \frac{\mu_B^2 B}{kT} l(l+1).$$

A mágneses momentumok láthatóan az ellenkező irányba állanak be a hőmérséklet előjelének változásával. Ezt az energiaszintekhez tartozó rendezettség eleve megköveteli. Az entrópia megváltozása ${}_e S = {}_e S(T, H)$ esetén

$$d_e S = \left(\frac{\partial_e S}{\partial T} \right)_H dT + \left(\frac{\partial_e S}{\partial H} \right)_T dH. \quad (5.4)$$

Ha a változás adiabatikus, akkor

$$\left(\frac{dT}{dH} \right)_{_e S} = - \frac{T}{c_H} \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_H, \quad (5.5)$$

ahol c_H az állandó térerősség melletti fajhő.

A mágneses momentum hőmérséklet szerinti változása mindig negatív, tehát a jobb oldal előjelét a hőmérséklet szabja meg. Negatív hőmérsékleti tartományban tehát adiabatikus lemágnesezésnél a hőmérséklet növekszik, míg pozitív tartományban csökken. Mágnesezésnél a jelenség fordított.

6. HECHT FORMALIZMUSA

Hecht azzal vezette be formálisan a negatív hőmérsékletek tartományát, hogy a termodinamikai potenciál függvényekben megengedte a negatív hőmérsékleti értékeket is. Az entrópiát a belső, ${}_i S$ és a külső, ${}_e S$ entrópiatagok összegeként vesszük figyelembe (${}_i S$ tartalmazza az irreverzibilis entrópia tagot is). A szabad energia és a szabad entalpia általános alakjai figyelemmel a belső energia 1.1. kifejezésére:

$$dF = -({}_e S + {}_i S) dT - T d{}_i S + \sum X_i dy_i. \quad (6.1)$$

A szabad entalpia (Gibbs-potenciál)

$$dG = -({}_e S + {}_i S) dT - T d{}_i S - \sum y_i dX_i. \quad (6.2)$$

Ha a külső paraméterek és a hőmérséklet állandó, akkor

$$\left(\frac{dF}{d{}_i S} \right)_{T, y_i} = -T \quad (6.3)$$

és

$$\left(\frac{dG}{d{}_i S} \right)_{T, x_i} = -T. \quad (6.4)$$

E két összefüggést a következőképpen világíthatjuk meg. Pozitív T esetén egyértelmű, hogy a belső entrópia növekedése a szabad energia és a szabad entalpia csökkenésével jár, hiszen a belső rendezetlenség, a belső entrópia növekedése a munkává alakítható energia csökkenésével jár.

Negatív hőmérsékleteknél hő, csak munka árán vihető a rendszerbe, amelynek így a szabad energiája, illetve a szabad entalpiája is kell, hogy növekedjék.

A formalizmus jogosságát a lineáris oszcillátorok 2.1, 2.5. egyenletek teszik indokolttá.

7. REVERZIBILIS—KVÁZISTATIKUS FOLYAMATOK

7.1.

Vezessünk be egy ϑ tetszőleges hőmérsékletet. Ha két rendszert érintkezésbe hozunk és azt tapasztaljuk, hogy

$$\Delta U + \Delta U^* = \Delta Q + \Delta Q^* = 0 \quad (7.1)$$

esetén

$$\Delta U^* > 0 \text{ és } \Delta U < 0, \text{ akkor } \vartheta^* < \vartheta,$$

vagyis a csillagos rendszer a hidegebb. Erre a ϑ hőmérsékletre mindig fennáll a

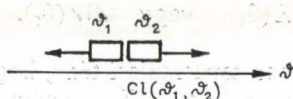
$$\left(\frac{\partial U}{\partial \vartheta} \right)_{\vartheta_i} > 0$$

kapcsolat.

A klasszikus termodinamika általánosítására három szemléletes folyamatot vezettek be [3]. Ezeknél a folyamatoknál minden manipuláció megengedett, a folyamat végén azonban a külső paramétereknek meg kell egyezni a kiindulási értékekkel. Ez a megkötés nem jelent egyebet, minthogy a folyamat egy periodikusan működő gép ($\Delta X_i = \Delta y_i = 0$). Ezek után határozzuk meg a három folyamatot.

Clausius-folyamat

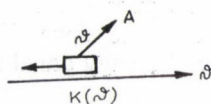
A $Cl(\vartheta_1, \vartheta_2)$ folyamatnak nincs más hatása, ha a két rendszert kapcsolatba hozzuk, mint az, hogy a kezdeti hőmérsékletű két rendszer közül a hidegebb még hidegebb, a melegebb még melegebb lesz.



2. ábra

Kelvin-folyamat

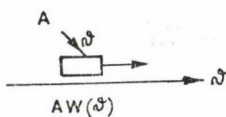
A $K(\vartheta)$ folyamatban a kezdeti ϑ hőmérsékletű rendszer lehűl és az így elszenvedett veszteséget „A” munka formájában lehet hasznosítani.



3. ábra

Munkát hővé alakító folyamat

Az $AW(\vartheta)$, munkát hővé alakító folyamatnak az a hatása, hogy a ϑ kezdeti hőmérsékletű rendszert felmelegíti és az így fellépő energia-nyereség megfelelő külső munkavégzésből származik.



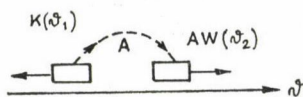
4. ábra

Megvizsgáljuk a három folyamat előfordulását. A második főtételt így fogalmazzuk meg: Nem létezik Clausius-folyamat semmiféle argumentum mellett sem.

$$\stackrel{(-)}{\text{Cl}}(*, *).$$

A másik két folyamatot kapcsolatba hozva egymással, arra várunk feleletet, hogy milyen feltételek mellett valósulhatnak meg.

Legyen $\vartheta_1 < \vartheta_2$ és tegyük fel, hogy létezik a $K(\vartheta_1)$ és az $AW(\vartheta_2)$ folyamat.



5. ábra

Az ábra szerinti kapcsolatban Clausius-folyamatot kapunk, amelynek előfordulását kizártuk. Következésképpen valamelyik folyamat az adott feltételek esetén nem valósul meg. Tehát

$$\stackrel{(-)}{K}(\vartheta_1), \text{ vagy } \stackrel{(-)}{AW}(\vartheta_2).$$

A klasszikus termodinamikában tapasztalati tény, hogy az $AW(\vartheta)$ folyamat mindig végbemegy. Ebből az következne, hogy $K(\vartheta)$ folyamat a természetben nem létezhet. Ez nem közvetlen folyománya a második főtételnek, azaz a Clausius-folyamatnak, hanem annak a kiegészítő axiómának a következménye, mely szerint $AW(\vartheta)$ folyamat mindig lehetséges. Ez ugyanaz a feltétel, mint az, hogy $\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_{y_i}$, csak pozitív lehet. Ezt a kiegészítő axiómát nem használjuk fel, éppen az általánosíthatóság érdekében, annál is inkább, mivel nem zárhatjuk ki eleve annak a feltételezését, hogy a különböző ϑ tartományok különböző kategóriát is jelentenek.

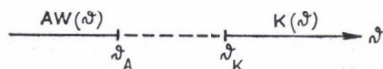
Ekkor tehát, ha $\vartheta_1 < \vartheta_2$, a következőképpen járhatunk el. Létezzék a ϑ_a hőmérsékleten $AW(\vartheta_a)$ folyamat. Ekkor ϑ_a , vagy annál alacsonyabb hőmérsékleten nem létezhet Kelvin-folyamat,

$$\stackrel{(+)}{AW}(\vartheta_a) \dots \stackrel{(-)}{K}(\vartheta_a - |\Delta\vartheta_a|).$$

Ha viszont létezik a $K(\vartheta_k)$ folyamat, akkor a ϑ_k -nál magasabb hőmérsékleten nincs $AW(\vartheta_k)$ folyamat.

$$\stackrel{(+)}{K(\vartheta_k)} \dots \stackrel{(-)}{AW(\vartheta_k + |\Delta\vartheta_k|)}.$$

A ϑ skálán tehát az AW folyamatok felülről, a Kelvin-folyamatok pedig alulról korlátosak. Ha a legnagyobb alsó korlátot ϑ_A -val, a legkisebb felső korlátot pedig ϑ_K -val jelöljük, akkor



6. ábra

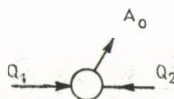
Ezek szerint a hőmérsékleti tartományt a következőképpen oszthatjuk fel. A $\vartheta \leq \vartheta_A$ tartományban csak AW , a $\vartheta \geq \vartheta_K$ tartományban pedig csak Kelvin-folyamatok léteznek.

A közbensőben $\vartheta_A \leq \vartheta \leq \vartheta_K$ sem AW , sem K folyamat nem fordulhat elő. Úgy tűnik, hogy ennek a hőmérsékleti tartománynak nincs fizikai jelentősége.

A fentiekből egyidejűleg következik, hogy — mivel a pozitív Kelvin hőmérsékleti tartományban az AW folyamatot mindig végre lehet hajtani — a $\vartheta \leq \vartheta_A$ a pozitív hőmérsékletek tartománya. Ezt a szemléletes megállapítást anélkül tettük, hogy azt az előbbieken vázoltak alapján bizonyítottuk is tartanók.

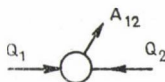
Ezek után játszatsuk le a lehetséges Carnot körfolyamatokat. Ha a két izotermán a hőcsere az R_1 , R_2 hőtárolókból Q_1 és Q_2 , akkor logikailag négy alaptípusa lehet a Carnot körfolyamatoknak.

$$C_0 \text{ folyamat } Q_1 + Q_2 = A_0 = 0, \quad Q_1 \geq 0; \quad Q_2 \leq 0,$$



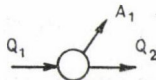
7. ábra

$$C_{12} \text{ folyamat } Q_1 + Q_2 = A_{12}, \quad Q_1 \geq 0; \quad Q_2 \geq 0,$$



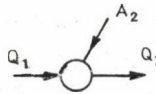
8. ábra

$$C_1 \text{ folyamat } -Q_1 + Q_2 = A_1, \quad Q_1 < 0, \quad Q_2 > 0,$$



9. ábra

C_2 folyamat $Q_1 - Q_2 = A_2$, $Q_1 > 0$, $Q_2 < 0$.

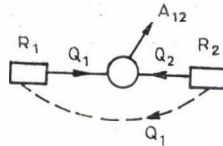


10. ábra

Ezeket a folyamatokat úgy vizsgáljuk, hogy a folyamat végén az egyik hőtároló mindig az eredeti állapotába jusson vissza. Természetesen a hőáramlás iránya mindig $\vartheta_2 \rightarrow \vartheta_1$ a hőtárolók között.

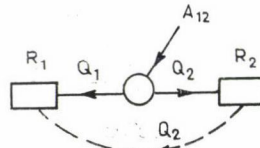
A C_0 folyamatnál egyszerű átrendezés után látjuk, hogy az Clausius folyamat, $-Q_1 = Q_2$, tehát nem valósítható meg.

A C_{12} folyamat úgy játszódik le, hogy a rendszer mind a két izotermán hőt vesz fel vagy ad le. A folyamat tehát



11. ábra

Vezessünk a ϑ_1 hőmérsékletű R_1 hőtárolóba Q_1 hőt a ϑ_2 hőmérsékletű R_2 hőtárolóból. Ezzel az R_1 kiindulási állapota helyreállt. Ez a folyamat egy $K(\vartheta_2)$, azaz $\vartheta_K \equiv \vartheta_2$. Fordítsuk meg a körfolyamatot,



12. ábra

Itt az R_2 hőtárolót hozzuk a kiindulási állapotba. Ez tehát egy $AW(\vartheta_1)$ folyamat, ahol $\vartheta_1 \equiv \vartheta_K$.

Az elmondottakból következnek, hogy mivel $\vartheta_A \equiv \vartheta_K$,

$$\vartheta_1 \equiv \vartheta_A \equiv \vartheta_K \equiv \vartheta_2.$$

Ebből egyértelműen látható, hogy a

$$\vartheta_1 < \vartheta_2 \equiv \vartheta_A \text{ és } \vartheta_K \equiv \vartheta_1 < \vartheta_2$$

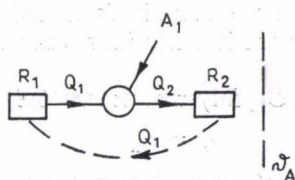
egyidejűleg nem teljesíthető, azaz sem munkát termelő, sem munkát hővé alakító K vagy AW folyamat nem valósítható meg így reverzibilis, kvázistatikus úton. Egy hő-

mérsékleti tartományon belül tehát C_{12} folyamat nem hajtható végre. Ha a két hőmérsékleti tartomány között létezik reverzibilis adiabatikus ugrás, vagyis a

$$\vartheta_1 \equiv \vartheta_A \equiv \vartheta_K \equiv \vartheta_2$$

egyenlőtlenségnek megfelelően mehetnek végbe folyamatok, akkor ezzel a hő és más energiák közti teljes egyenértékűség az általánosított termodinamikában igazolást nyer. Valószínűsíthető, hogy az igen kiterjedt rendszerek termodinamikai egyensúlyának ez a feltétele.

Vizsgáljuk a másik két folyamatot. A C_1 folyamatot hőszivattyúval tesszük szemléletessé.



13. ábra

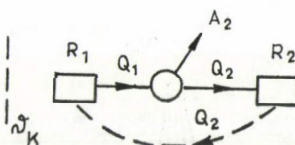
A folyamat $AW(\vartheta_2)$, tehát

$$\vartheta_1 < \vartheta_2 \equiv \vartheta_A$$

és

$$\left| \frac{Q_2}{Q_1} \right| > 1.$$

A C_2 folyamatot az alábbiak szerint építjük fel.



14. ábra

Ez láthatóan egy $K(\vartheta_1)$ folyamat, amelyre

$$\vartheta_K \equiv \vartheta_1 < \vartheta_2$$

és

$$\left| \frac{Q_2}{Q_1} \right| < 1.$$

Szót kell még ejteni a

$$\vartheta_A \equiv \vartheta_1 < \vartheta_2 \equiv \vartheta_K$$

reláció szerinti ϑ_1, ϑ_2 közti folyamatról. Az egyértelmű, hogy a $\vartheta_A \equiv \vartheta \equiv \vartheta_K$ hőmérsékleti közben sem K , sem AW folyamat nem játszatható le. Kérdés, mi a helyzet a C_{12} körfolyamattal? A közbenső tartományban a C_{12} folyamat sem valósulhat meg, mert mint láttuk, az a hőfelvétel előjele szerint $K(\vartheta)$ vagy $AW(\vartheta)$ folyamat. Így tehát az

izotermák adiabatikus — kvázistatikus úton nem köthetők össze, vagyis az adiabatikus — kvázistatikus folyamatok egyben izotermikusak is.

Mivel a közbenső tartomány ($\vartheta_A \leq \vartheta \leq \vartheta_K$) fizikailag jelenlegi ismereteink szerint nem értelmezhető, annak fizikai realitását jelenleg nem tudjuk meghatározni, ezért feltehetjük, hogy

$$\vartheta_A = \vartheta_K = 0.$$

Ezt egyszerű átskalázással elérhetjük.

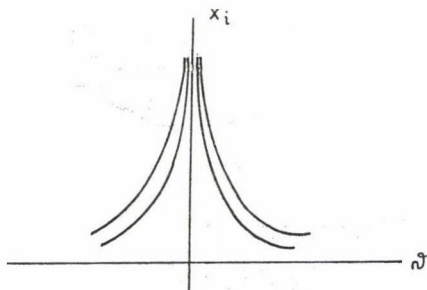
Egy kérdés azonban még nyitva marad. A klasszikus termodinamikában minden reverzibilis folyamat egyben kvázistatikus is, vagyis a folyamat folytonosan közel egyensúlyi állapotokon megy végbe. Ez egy tapasztalati tényt fejez ki, amelyet kiegészítő axiómaként vezettek be. Ha ettől a kiegészítő axiómától eltekintünk, akkor egy reverzibilis folyamat, amely nem kvázistatikus, csak reverzibilis ugrásként képzelhető el.

Kérdés marad azonban a C_{12} folyamatok lehetősége, ha

$$\vartheta_A = \vartheta_K.$$

Az adiabaták helyzete a ϑ , X_i síkon a következő megfontolással határozható meg. Az adiabatákat a $dQ_{kv}=0$ és a $dQ_{ad}=0$ differenciálegyenletek határozzák meg, és ezek megoldásai adják a görbéket. Ezeket az adiabatákat az egymással kvázistatikusán összeköthető állapotok osztályaiként is jellemezhetjük. A $dQ_{kv}=0$ és a $dQ_{ad}=0$ csak akkor azonosak, ha a folyamat folytonosan egyensúlyi állapotokon megy át, tehát nincs ugrás. Megjegyzendő, hogy ez az adiabatikus folyamat egyben izentropikus is, mivel $d_i S=0$.

Az irodalomra hivatkozva [3] — a részletes elemzést mellőzve — azt mondhatjuk, hogy pl. a termodinamikai hiperfelület X_i , ϑ síkján nincsenek olyan adiabaták, amelyek a $\vartheta=0$ izotermát metszik. Az adiabaták ezt az izotermát aszimptotikusan közelítik meg.



15. ábra

A két hőmérsékleti tartomány között tehát nem mehetnek végbe olyan adiabatikus átmenetek, amelyek egyben kvázistatikusak is. Ha a termodinamika általánosítása során érvényesnek tartjuk azt a feltételt, amely szerint minden reverzibilis folyamat egyben kvázistatikus is, akkor ezzel a C_{12} folyamatok lehetetlenségét kimutattuk.

Más fogalmazásban: A C_{12} folyamatok megvalósulásának feltétele, hogy a két hőmérsékleti tartomány között reverzibilis adiabatikus átmenetek legyenek végrehajthatók, amelyek így természetüknél fogva nem lehetnek kvázistatikusak.

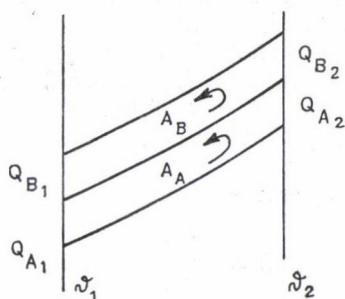
7.2. A ϑ és T közötti kapcsolat

Működjen egy Carnot gép $\vartheta_1 < \vartheta_2$ hőmérsékletek között. Ekkor Q_1 és Q_2 , vagy Q_1 és A nem írható elő önkényesen, hanem ezek között egyértelmű függvény kapcsolat van, pl.

$$Q_1 = f(A, \vartheta_1, \vartheta_2), \quad (7.2.1)$$

ahol f a változók általános függvénye.

Vegyünk fel két azonos munka közegű, de különböző munkavégzésű, $\vartheta_1 - \vartheta_2$ hőmérsékletek között lejátszódó Carnot körfolyamatot



16. ábra

A közös, de ellenkező irányban befutott adiabata miatt a végzett munka

$$A = A_A + A_B.$$

Figyelemmel a 7.2.1. kapcsolatra

$$Q_{A1} = f(A_A, \vartheta_1, \vartheta_2),$$

$$Q_{B1} = f(A_B, \vartheta_1, \vartheta_2),$$

illetve

$$Q_{A1} + Q_{B1} = f(A_A + A_B, \vartheta_1, \vartheta_2),$$

$$f(A_A + A_B, \vartheta_1, \vartheta_2) = f(A_A, \vartheta_1, \vartheta_2) + f(A_B, \vartheta_1, \vartheta_2). \quad (7.2.2)$$

Ebből következően

$$\frac{\partial f(A_A + A_B, \vartheta_1, \vartheta_2)}{\partial (A_A + A_B)} \frac{\partial (A_A + A_B)}{\partial A_A} = \frac{\partial f(A_A, \vartheta_1, \vartheta_2)}{\partial A_A}.$$

Általánosan tehát

$$df = \varphi dA$$

$$\text{és} \quad f = \varphi(\vartheta_1, \vartheta_2) A + \chi,$$

vagyis f az A -nak lineáris függvénye. A χ integrálási állandót nullának vehetjük.

Visszakanyarodva 7.2.2. egyenletekhez

$$Q_1 = A\varphi = \varphi(Q_1 + Q_2),$$

amelyből

$$\varphi = \frac{1}{1 + Q_2/Q_1}.$$

Általánosan írhatjuk tehát, bevezetve a $T(\vartheta)$ függést is

$$-\frac{Q_1}{Q_2} = F(\vartheta_1, \vartheta_2) = \frac{T(\vartheta_1)}{T(\vartheta_2)}. \quad (7.2.3)$$

A mínusz előjel onnan ered, hogy az előzőekben nem láttuk el előjelesen a felvett és leadott hőmennyiségeket. Látható, hogyha akár az egyik, akár a másik hőmérsékleti tartományban játszódik le a folyamat, $T(\vartheta_1)/(T(\vartheta_2))$ nem vált előjelet, vagyis mind a Kelvin, mind az AW folyamatra igaz a 7.2.3. összefüggés.

Ha Q_1 és Q_2 előjele azonos, akkor C_{12} folyamatot jellemeztünk. Ekkor azonban a hőmérsékletek viszonya negatív, tehát a C_{12} folyamat csak a hőmérsékleti tartomány átlépésével valósulhat meg.

Szorítkozzunk a 7.2.3. egyenletre a következő alakban,

$$T(\vartheta_2) = \left| \frac{Q_2}{Q_1} \right| T(\vartheta_1),$$

vagyis $\vartheta < 0$ esetén $\left| \frac{Q_2}{Q_1} \right| > 1$, az abszolút hőmérséklet monoton nő, $\vartheta > 0$ esetén

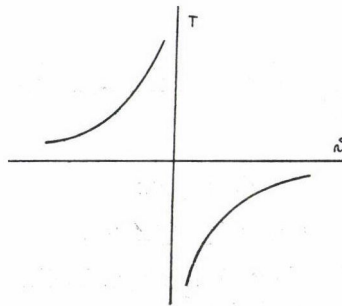
$\left| \frac{Q_2}{Q_1} \right| < 1$, az abszolút hőmérséklet monoton csökken az argumentuma, ϑ szerint.

Ha nem léteznek C_{12} folyamatok a $\pm \vartheta$ értékre $T(\pm \vartheta)$ -nak ugyanaz az előjele. Ekkor azonban nem elegendő az egyensúlyi állapot meghatározásához a T és az X_i -k (vagy y_i -k) megadása, hanem szükség van még a ϑ pozitív és negatív értékeinek egyértelműsítése miatt egy kiegészítő függvényre, amely ± 1 értéket vehet csak fel.

Ezzel egyenértékű az a választás is, hogy

$$T(\vartheta) > 0, \quad \text{ha } \vartheta < 0 \quad \text{és}$$

$$T(\vartheta) < 0, \quad \text{ha } \vartheta > 0, \quad \text{vagyis}$$



17. ábra

A következőkben a $T(\vartheta)$ kapcsolatban az ábra szerinti összefüggést használjuk, de megkeressük az analitikai kapcsolatot is oly módon, hogy meghatározzuk a $dQ_{kvt}=0$ egyenletnek az integráló tényezőjét azzal a termodinamikában ismert megkötésekkel, hogy

izotermikus reverzibilis folyamatoknál a munka az úttól független;
a termodinamikai rendszer minden állapotához tartoznak adiabatikusan elérhetetlen állapotok.

A szabad energiát a következőképpen írjuk fel

$$dF = \sum \left(\frac{\partial F}{\partial y_i} \right)_\vartheta dy_i + \left(\frac{\partial F}{\partial \vartheta} \right)_{y_i} d\vartheta. \quad (7.2.4)$$

A jobb oldal első tagja a negatív differenciális munka $-dA$. Az első főtételel figyelemmel

$$dQ_{kv} = \sum \frac{\partial}{\partial y_i} (U - F)_\vartheta dy_i + \left(\frac{\partial U}{\partial \vartheta} \right)_{y_i} d\vartheta. \quad (7.2.5)$$

Ennek a differenciálegyenletnek az integráló tényezője $-\vartheta$. Tudjuk viszont, hogy a Kelvin skálán ugyanennek az egyenletnek az integráló faktora $1/T$. Következésképpen a két hőmérséklet közötti kapcsolat $\vartheta = -1/T$.

Vizsgáljuk még meg a $\vartheta=0$ esetében a $dQ_{kvt}=0$ adiabata egyenlet helyességét.

A 7.2.5. egyenlet jobb oldalának második tagjában U , ha $\vartheta \rightarrow 0$, végtelen nagy nem lehet, ezért

$$\lim_{\vartheta \rightarrow 0} \left(\frac{\partial U}{\partial \vartheta} \right)_{y_i} \rightarrow 0.$$

Az első tagról könnyen belátható, hogy annak is nullát kell adnia, hiszen

$$\lim_{\vartheta \rightarrow 0} \frac{dy_i}{d\vartheta} = - \frac{\left(\frac{\partial U}{\partial \vartheta} \right)_{y_i}}{\left(\frac{\partial (U - F)}{\partial y_i} \right)_\vartheta} \rightarrow \infty,$$

az adiabata aszimptotikusan közelíti meg a $\vartheta=0$ izotermát. Ez az izoterma egyben adiabata is. Ez a szinguláris viselkedés az előzőek alapján várható volt.

A $\vartheta = -1/T$ hőmérséklet-függés szerint tehát a $-\vartheta$ a pozitív, a $+\vartheta$ a negatív abszolút hőmérsékletek tartománya.

7.3. Adiabatikus folyamatok

Az adiabatát a kvázistatikus folyamatoknál a $\vartheta \leq 0$ tartományban az

$$S = \frac{U - F}{T} \quad (7.3.1)$$

kapcsolattal adjuk meg. Ez esetben az adiabatikus görbe egyben izentropikus is. A

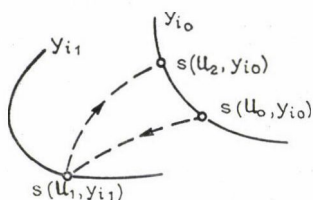
$$\left(\frac{\partial S}{\partial U} \right)_{y_i} = \frac{1}{T} = -\vartheta$$

összefüggés szerint S monoton nő a $\vartheta < 0$ és S monoton csökken a $\vartheta > 0$ tartományban a belső energia növekedésével.

Induljunk ki egy U_0, y_{i0} állapotból, és adiabatikus úton jussunk el az U_1, y_{i1} állapotba. Ekkor azt állítjuk, hogy

$$S(U_1, y_{i1}) \cong S(U_0, y_{i0}),$$

feltéve, hogy mind a két állapot ugyanabban a hőmérsékleti tartományban van, és a folyamat során nem léptünk át a másik tartományba, és onnan vissza.



18. ábra

Vigyük vissza a rendszert az y_{i0} paraméterhez tartozó állapotba adiabatikus kvázistatikus úton (U_2, y_{i0}). Ekkor

$$S(U_1, y_{i1}) = S(U_2, y_{i0}).$$

Mármost ha

$U_2 = U_0$, akkor reverzibilis,

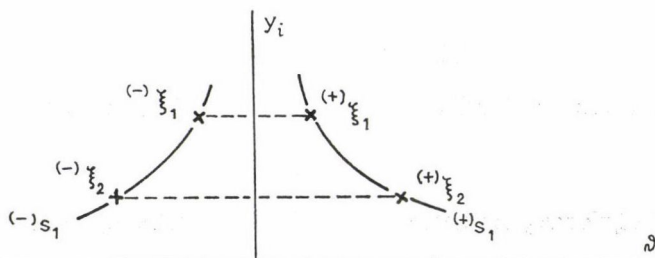
ha

$U_2 > U_0$, akkor AW ,

ha

$U_2 < U_0$, akkor Kelvin folyamat volt az eredeti folyamat.

A két hőmérsékleti tartomány között kvázistatikus átmenet nem valósítható meg. Ezért, ha átmenetekről beszélünk, az csak reverzibilis ugrás lehet. Vizsgáljunk ilyen eseteket egy ϑ, y_i síkon, ahol $(+)S_1 = (-)S_1$.



19. ábra

Tegyük fel, hogy létezik olyan reverzibilis ugrás, amely a $(+)^{\xi_1}$ állapotból a $(-)^{\xi_1}$ állapotba visz át. Ekkor azonban szükségszerűen — csak a reverzibilitást kihasználva — létezik a

$$(-)^{\xi_1} \rightarrow (+)^{\xi_1}$$

átmenet is, esetleg más változók mellett is, pl.

$$(-)^{\xi_2} \rightleftharpoons (+)^{\xi_2}.$$

A továbbiakban arra vonatkozóan kívánunk bizonyosságot szerezni, hogy adiabatikus reverzibilis ugrásoknál, amelyeket a két hőmérsékleti tartomány között játszunk le, nincs entrópia növekedés, azaz

$$(+)^S_i = (-)^S_i.$$

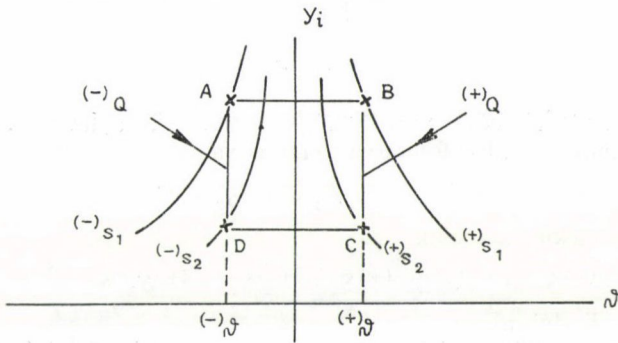
Ha nem zárjuk ki a C_{12} folyamatot, akkor a körfolyamat a következő

$A \rightarrow B$ adiabatikus reverzibilis ugrás.

$B \rightarrow C$ izoterm hőfelvétel,

$C \rightarrow D$ adiabatikus reverzibilis ugrás,

$D \rightarrow A$ izoterm hőfelvétel.



20. ábra

Ha bevezetjük a $T^{(-)\vartheta}$ és $T^{(+)\vartheta}$ Kelvin értékeket, akkor ismert alapösszefüggés szerint

$$\frac{(-)Q}{(+)\dot{Q}} = \frac{T^{(-)\vartheta}}{-T^{(+)\vartheta}}$$

vagy az entrópiákkal kifejezve a hőmennyiséget

$$\frac{T^{(-)\vartheta}}{-T^{(+)\vartheta}} = \frac{T^{(-)\vartheta}((-)S_1 - (-)S_2)}{T^{(+)\vartheta}(+)S_2 - (+)S_1},$$

azaz

$$(-)S_2 - (-)S_1 = (+)S_2 - (+)S_1 = \text{állandó}.$$

Ha az állandót nullának vesszük, akkor

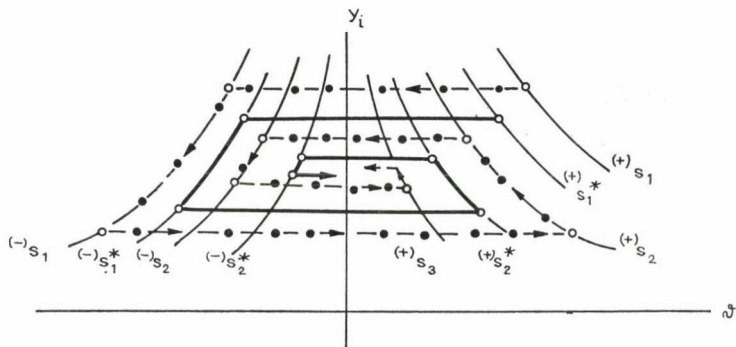
$$(-)S_1 = (+)S_1 \text{ és } (-)S_2 = (+)S_2.$$

Ha most elvetjük azt a feltevésünket, hogy C_{12} folyamatok léteznek, vagyis kizárjuk az adiabatikus reverzibilis ugrásokat, akkor az $(+)S_1$ -ből indulva definiálhatjuk azt a minimális entrópiájú $(-)S_1$ -et (szaggatott vonal), amely mellett még létre jön az

$$(+)\dot{S}_1 \rightarrow (-)\dot{S}_1$$

átmenet azzal, hogy

$$(+)\dot{S}_1 < (-)\dot{S}_1.$$



21. ábra

Ekkor azonban az $(-)S_1$ -ből nem az $(+)S_1$ -be jutunk vissza, hanem az $(+)S_2 > (+)S_1$ adiabatára érhetünk csak. Ezt folytatva az ábrán vázolt

$$(+)\dot{S}_1 < (-)\dot{S}_1 < (+)\dot{S}_2 < (-)\dot{S}_2 < (+)\dot{S}_3 \dots$$

esetben az átmenetek az alábbiak

$$(+)\dot{S}_1 \rightarrow (-)\dot{S}_1 \rightarrow (+)\dot{S}_2 \rightarrow (-)\dot{S}_2 \rightarrow (+)\dot{S}_3 \rightarrow \dots$$

Ha ugyanekkor kiindulunk az

$(+)\dot{S}_1^* > (+)\dot{S}_1$ állapotból, akkor az onnan elérhető minimális entrópiájú adiabatára

$$(-)\dot{S}_1^* > (-)\dot{S}_1 \text{ lesz.}$$

Így folytatva tovább a csillagos rendszer

$$(+)\dot{S}_1^* \rightarrow (-)\dot{S}_1^* \rightarrow (+)\dot{S}_2^* \rightarrow (-)\dot{S}_2^* \rightarrow \dots$$

átmeneteket követi.

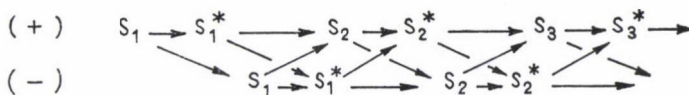
Ha megengedjük, hogy a két rendszer (a csillagos és a csillag nélküli) között is legyenek átmenetek, amelyek minimális entrópiánövekedéssel mennek végbe, akkor egy hőmérsékleti tartományon belül felírhatóak a következő átmenetek

$$(+) \quad S_1 \rightarrow S_1^* \rightarrow S_2 \rightarrow S_2^* \rightarrow S_3 \rightarrow S_3^* \rightarrow \dots,$$

illetve

$$(-) \quad S_1 \rightarrow S_1^* \rightarrow S_2 \rightarrow S_2^* \rightarrow S_3 \rightarrow S_3^* \rightarrow \dots$$

A két tartomány közötti átmeneteket is figyelembe véve az összes átmenet:



Rögzíthetjük, hogy korábbi feltételeink szerint csak az itt berajzolt átmenetek a megengedettek. Ugyanakkor az

$$(+S_1^* \rightarrow (-)S_1,$$

$$(-)S_1^* \rightarrow (+)S_2,$$

$$(+S_2^* \rightarrow (-)S_2,$$

$$(-)S_2^* \rightarrow (+)S_3$$

átmenetek tiltottak, holott

$$(-)S_1 > (+)S_1^*,$$

$$(+S_2 > (-)S_1^*,$$

$$(-)S_2 > (+)S_2^*,$$

$$(+S_3 > (-)S_2^*.$$

Ezek a kizárások, amelyek előírják, hogy az egyik tartományban adott állapothoz a másik tartományba történő adiabatikus átmenet során meghatározott az a minimális entrópiájú állapot, amelybe a rendszer juthat, azt jelentik, hogy az entrópia növekedése egy adott értéknél kisebb nem lehet.

A tiltott átmenetekkel egyben kizárjuk az adiabatikus reverzibilis ugrásokat. Ezzel azonban az átmeneti relációkra vonatkozó, egy azonos osztályba sorolt megelőző — rákövetkező folyamatok létezését tagadjuk.

Falk és Jung [4] axiomatikus termodinamikája szerint az egy azon osztályba tartozó adiabatikus átmenetek elágazás mentes átmeneti relációt definiálnak. Esetünkben az egyirányban lejátszatható adiabatikus — reverzibilisen elérhető állapotoknak a megelőző — rákövetkező reláció fogalma azt jelenti, hogy egy adott

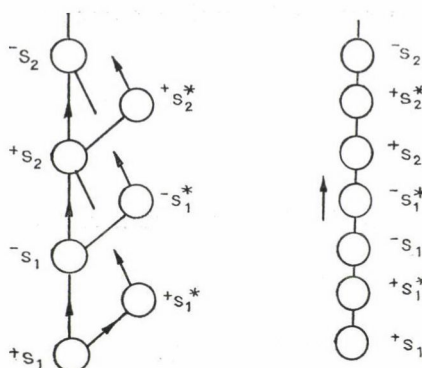
$$S_x < S_y < S_z < \dots$$

állapotsorozatban létezik az

$$S_x \rightarrow S_y \rightarrow S_z$$

átmenet, vagyis a folyamat elágazásmentes.

A sémát céljainknak megfelelően átrendezve berajzoljuk az elágazásos és az elágazásmentes relációkat.



22. ábra

Az elágazásos relációk alapján ki kell zárunk az adiabatikus reverzibilis ugrásokat, ezzel a C_{12} folyamatokat is. Nem lehetségesek tehát elágazásmentes relációk a két hőmérsékleti tartomány között adiabatikus átmenetek során, amelyek entrópia növekedéssel járnak.

Szükségszerű így olyan adiabatikus átmenetek létezése, amelyek nem eredményeznek entrópia-növekedést, vagyis léteznek reverzibilis adiabatikus ugrások.

IRODALOM

1. Norman F. Ramsay, Thermodynamics and Statistical Mechanics at Negative Absolute Temperatures, Physical Review, Vol. 103, Nr. 1., 1956.
2. Charles E. Hecht, Thermodynamic Potentials for Systems at Negative Absolute Temperatures Phys. Rev., Vol. 119, Nr. 5., 1960.
3. Schöpf, Hans-Georg, Zur Thermodynamik negativer absoluter Temperaturen. Annalen der Physik, Bd. 9, Heft 3—4., 1962.
4. G. Falk és H. Jung, Axiomatik der Thermodynamik. Handbuch d. Physik, III. 2., 1959.
5. E. Schrödinger, Statische Thermodynamik. J. A. Barth, Leipzig, 1952.
6. Kirschner I., Termodinamikai állapotok stabilitása: M. Fizikai Folyóirat, 17. N°-1., 1969.
7. Horváth, A vegyipari hidegtechnológia alapjai. Műszaki Könyvkiadó, 1963.
8. Feynman Fizika. 7. k. (87.21.)

INTEGRÁLT ÁRAMKÖRÖK SUGÁRÉRZÉKENYSÉGE*

I.

BERECZKINÉ KERÉNYI ILONA

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

Űreszközök elektronikájában előnyösen alkalmazhatók a CMOS-eszközök; kis teljesítményigényük, széles típusválasztékuk és a nagy integráltságból adódó kis hely- és súlyigényük miatt. A kozmikus sugárzással szemben azonban érzékenyek ezek az eszközök, ionizáló sugárzás hatására romlanak a paramétereik és bizonyos sugárdózis fölött funkcionálisan is hibáznak.

Ez a három részre tervezett cikksorozat rövid áttekintő bevezetés után a CMOS IC-k kozmikus sugárérzékenységeivel kíván részletesen foglalkozni, elsősorban az ionizáló sugárzás hatására kialakuló paraméterromlás mennyiségi és minőségi tényezőivel, a besugárzás alatti elektromos állapot hatásával, valamint az áramkörök „keményítésének” problémájával.

Az I. rész az általános áttekintést és az SSI IC-k elemzését tartalmazza, a II. rész az MSI IC-k elemzésével, a III. rész pedig az LSI IC-k elemzésével kíván foglalkozni.

BEVEZETÉS

A 60-as évek közepe táján már komoly eszközökkel folyt a Föld körüli tér és a nyílt űr vizsgálata. Satellites és űrszondák szolgáltatottak információt a kozmikus tér tulajdonságairól egyre nagyobb számú és egyre bonyolultabb elektronikus berendezések segítségével. A berendezésekben alkalmazott aktív alkatrészek is gyorsan fejlődtek, tért hódítottak a vékonyréteg tranzisztorok és megjelentek a MOS eszközök. Ekkor jelentkezett a félvezető eszközök sugárérzékenységeinek problémája, ugyanis a vékonyréteg és a MOS-eszközök intenzív paraméterromlást mutattak kozmikus sugárzás hatására. A későbbiek során egyre kiterjedtebb kutatómunka indult meg a sugárérzékenységgel kapcsolatban, aminek alapvetően két oka volt:

1. egyre hosszabb idejű űrprogramokat terveztek, a sugárzás károsító hatása viszont akumulálódik, tehát korlátozza a berendezések élettartamát;
2. a kisáramú CMOS IC-k, a dinamikus memóriák és az egyre nagyobb integráltságú (LSI, VLSI) áramkörök egyre inkább sugárérzékenyek bizonyultak.

Az űrprogramok tervezésekor tehát szükségessé vált a várható kozmikus sugárzás becslése és a sugárzás hatásának figyelembevétele az áramkörök tervezése során. Intézetünk a VEGA-űrprogram keretében foglalkozott ezzel a problémával, jelen cikk a kutatómunka során elért lényegesebb eredményeket kívánja ismertetni.

* Érkezett 1984. jún. 17.

A kozmikus sugárzás hatása félvezetőkre

A kozmikus sugárzás legnagyobbbrészt elektronból és protonból áll, a neutron és γ -sugárzás részaránya lényegesen kisebb. Tartós kozmikus sugárzás hatására minden félvezető eszköz degradálódik, de típustól és technológiától függően más-más módon és mértékben. A kozmikus sugárzás károsító hatásai közül a három leglényegesebb:

— Ionizáló hatás

A sugárzás kölcsönhatásba lép az atomok elektronjaival, szabad elektronokat és pozitív ionokat hozva létre. A szabad elektronok elmozdulnak, rekombinálódnak vagy semleges atomokhoz kötődnek, a pozitív lyukak viszont befogódnak és állandó pozitív töltésként jelentkeznek. A töltésbefogódás elsősorban a gate-oxidban jelentkezik, mértéke a sugárzás totáldózisától, eloszlása pedig a besugárzás alatti bias állapottól függ.

— Displacement hatás

Nagyobb energiájú gyors részecskék ütközés útján atomi rácshibát okozhatnak a félvezető anyagban. A kimozdított atom újabb ütközések és a rács termikus vibrációja során veszíti el energiáját és kerül ismét nyugalomba. A kimozdított atom mozgása közben másodlagos lyukelektron párokat is képezhet. Ez a hatás a sugárzás relatív hatékonyságával arányos.

— Tranziens interferencia hatás

A sugárzás hatására az anyag elektronjai gerjesztődnek, lyuk-elektron párok keletkeznek. Nagy intenzitású sugárzásban a párok nem tudnak rekombinálódni, állandó lyuk-elektron pár fölösleg keletkezik. Ez a hatás csak bizonyos intenzitás érték fölött jelentkezik és a sugárzás dózisteljesítményével arányos.

Az egyes félvezető eszközök különbözőképpen viselkednek kozmikus sugárkörnyezetben [12]. Néhány eszköz kritikus dózisértékét az 1. táblázat tartalmazza [7]. A totál dózis küszöb a MOS/CMOS-eszközöknél a legalacsonyabb, tehát ezek a legérzékenyebbek az ionizáló hatással szemben. A displacement hatásra viszont a bipoláris eszközök érzékenyebbek. Mivel üreszközök elektronikájában a CMOS-eszközök igen

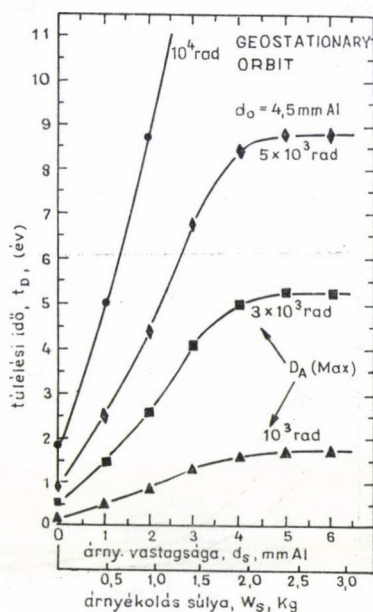
1. TÁBLÁZAT

Alkatrészek kritikus határdózisa

Alkatrésztípus	Tipikus totáldózis határérték [rad/Si]	Tipikus proton displacement határérték [p/cm ² (20 MeV)]
LOW POWER BIPOLAR	10 ⁴	10 ⁹ —10 ¹¹
POWER BIPOLAR	10 ⁴	10 ⁸ —10 ¹⁰
BIPOLAR LINEAR IC	10 ⁴	10 ¹⁰
BIPOLAR DIGITAL IC	10 ⁶	10 ¹²
MOS/CMOS DIGITAL	10 ³ —10 ⁴	—
HARDENED CMOS	10 ⁵	—
ZENER DIODE	10 ⁶	10 ¹⁰
LED, PHOTODIODE	10 ⁴	4 × 10 ¹⁰

előnyösen alkalmazhatók — kis teljesítményigényük, széles típusválasztékuk és a nagy integráltságból adódó kis hely- és súlyigényük miatt — ezért elsősorban a CMOS-alkatrészek sugártűrésével érdemes részletesebben foglalkozni [10].

Ahhoz, hogy egy félvezető eszközt kozmikus sugárzó környezetben alkalmazzunk, az illető eszköz sugártűrése mellett ismernünk kell a várható sugárdózis értékét is. Az 1. ábra CMOS-eszközökre mutat érdekes összefüggést, [9] az eszköz sugártűrése ($D_{A\max}$ -rad (Si)-ban), az árnyékolás vastagsága (d_s -mm Al-ban) és a várhatóan hibamentes repülési idő (t_D -évben) között. Ebben az összefüggésben paraméterként szerepel a repülés során várható sugárdózis, amit jelen esetben egy átlagértékkel vettek figyelembe, a geostacioner orbitális pályára vonatkozó dózisértékek sok éves átlagával. Egy adott pályájú űreszköz esetében azonban konkrét dózisértékek becsülhetők, sőt a repülés egész folyamatára készíthető dózistérkép.

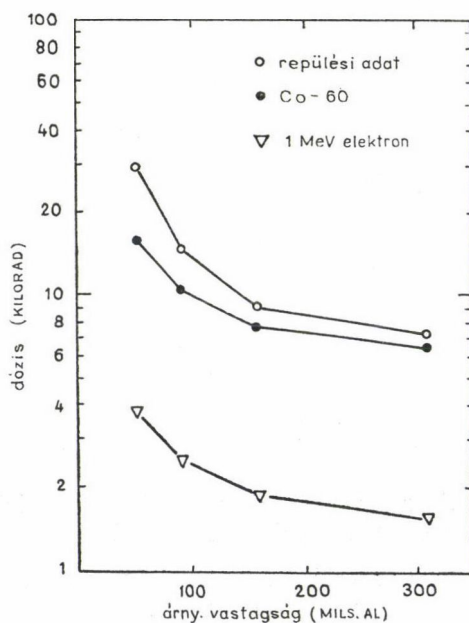


1. ábra. CMOS eszközök túlélési valószínűsége az árnyékolás függvényében

Az ionizáló sugárzás megengedhető maximális sugárdózisa ($D_{A\max}$) méréssel határozható meg [8]. A méréssel kapcsolatban felvetődik néhány probléma.

1. $D_{A\max}$ kiméréséhez olyan sugárdózist kell kapnia az eszköznek, amely maradandó paraméterromlást eredményez és erőteljesen lecsökkenti az eszköz további sugártűrése képességét. Ezért ez a mérés roncsolásos vizsgálatnak tekintendő, semmiképpen nem végezhető el a beépítésre kerülő darabokon. Felvetődik a kérdés, hogy mintadarabok vizsgálatából mennyire lehet következtetéseket levonni a többi eszközre vonatkozóan. Amennyiben biztosítani tudjuk, hogy egyazon cég egyazon gyártási sorozatából kikerült eszközök kerüljenek beépítésre, akkor az ezekből

- kivett mintadarabok vizsgálata elég pontos képet ad a többi eszköz viselkedéséről. Legtöbbször elegendő, ha azt tudjuk, hogy egy cég azonos évjáratú gyártmányaival rendelkezünk és a cég abban az évben nem módosította jelentősen a technológiáját. Ez az információ a legtöbb esetben megszerezhető, míg az előző feltétel elég nehezen teljesíthető. Különböző cégek gyártmányai vagy egyazon cég erősen eltérő évjáratú eszközei nagyon eltérően viselkedhetnek azonos sugárdózis hatására.
2. A kozmikus sugárzást földi körülmények között modellezni kell. Ionizáló hatás szempontjából a kozmikus sugárzás elektron összetevői a leglényegesebbek. Ezek az elektronok viszonylag széles energiaspektrummal rendelkeznek. Monoenergiás elektronnyalábbal való modellezésük tehát nem kedvező. A valóságot jobban közelítő — és lényegesen kényelmesebben használható — besugárzó eszköz a Co60 forrással működő γ -sugárzó, amely a besugárzott eszközben keletkező másodlagos elektronok révén fejt ki ionizáló hatást. Az Explorer 55 űrkísérlet során szerzett tapasztalatok bizonyítják, hogy a Co60-as modellmérések jobban megközelítik az űrbeli mérések eredményeit, mint az 1 MeV-es elektronnal végzett mérések (2. ábra). [6], [11].
 3. A besugárzás hatásának számszerű értékeléséhez jól mérhető és a sugárzás hatására egyértelműen változó paramétert kell választani. CMOS-eszközök esetében ez a paraméter a küszöbfeszültség, azaz az a V_{GS} feszültség, ahol az áramfelvétel



2. ábra. Azonos küszöbfeszültség eltolódáshoz tartozó dózisok különböző árnyékolások mögött. Az űrhajón mért sugárértékekből becsült és a Co60-al, illetve 1 MeV-es elektronnal modellezett dózisértékek összehasonlítása

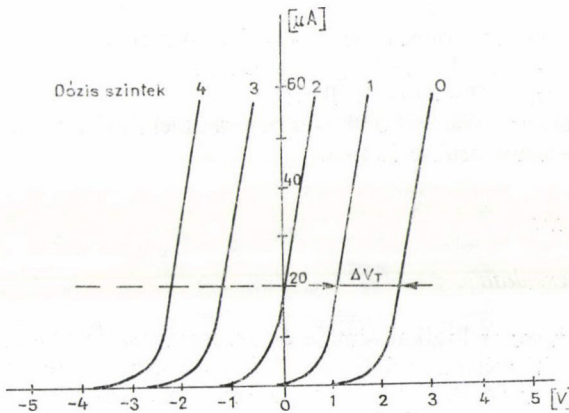
elér egy adott küszöbértéket (pl. $20\ \mu\text{A}$ -t). Besugárzás hatására a küszöbfszültség eltolódik, az eltolódás mértéke arányos az ionizáló sugárzás totáldóziséval. Ezzel definiálhatjuk a $D_{A\max}$ kritériumát is. [2]

A 3. ábra az n -csatorna áramkarakterisztikájának eltolódását, a 2. táblázat pedig az egyes dózisszintekhez tartozó hibajelenségeket mutatja. [9]

2. TÁBLÁZAT

CMOS hibajelenségek a totáldózis függvényében

Dózisszint	Hibajelenség	Átlagos totáldózis és V_T CMOS SSI IC-knél [rad/Si]
1	Zaj-immunitás csökken, esetleg csökken a kapcsolási sebesség is	5×10^3 ($\Delta V_T \sim 1\ \text{V}$)
2	A küszöbfszültség eléri a nullát, emiatt a nyugalmi áram rohamosan nőni kezd	1×10^4 ($\Delta V_T \sim 2\ \text{V}$)
3	Kapcsolási sebesség csökken	3×10^4 ($\Delta V_T \sim 3\ \text{V}$)
4	Az n -csatorna nem tud lezárni, várható a funkcionális hiba megjelenése	6×10^4 ($\Delta V_T \sim 4\ \text{V}$)



3. ábra. CMOS n -csatorna $I_D - V_{GS}$ áramkarakterisztika eltolódása besugárzás hatására

Kisintegráltságú — SSI és MSI — eszközök esetében maximálisan megengedhető dózisként legelfogadottabb a 2-es szintet választani, mert ez az a határ, ameddig nyugalmi állapotban mindkét csatorna le tud zárni, tehát CMOS jellegűnek tekinthetjük az eszköz működését. A $V_T = 0\text{V}$ állapot funkcionális hibát még nem okoz, legfeljebb a tápáramfelvétel nő meg kellemetlen, esetleg megengedhetetlen mértékben. LSI eszközök esetében bonyolultabb a helyzet, egyrészt, mert a nagyobb elemsűrűség miatt ugyanaz a sugárdózis nagyobb valószínűséggel ionizál, másrészt a bonyolultabb

belső áramköri kapcsolatok miatt kisebb mérvű paraméterváltozás is okozhat funkcionális hibát. LSI IC-knél vagy a funkcionális hibát okozó dózis biztonsági faktoral csökkenített értékét, vagy az előírt nyugalmi áramhoz tartozó dózisértéket tekinthetjük maximálisan megengedhető dózissnak.

Kisintegráltóságú CMOS IC-k sugártűrés vizsgálata

A vizsgálat feltételei:

Sugárforrás: Co60 γ -besugárzó

Dózisteljesítmény: 3,8—19,2 krad (Si) óra

Hitelesítés: Fricke oldatos és TLD doziméterrel

Besugárzás alatt az IC lehetséges üzemmódjai:

$IN - U_{DD} = 5V$ vagy $10V$; $U_{IN} = 100$ kHz-es négyszögjel;

$H - U_{DD} = 5V$ vagy $10V$; $U_{IN} = U_{DD}$

$L - U_{DD} = 5V$ vagy $10V$; $U_{IN} = OV$

$OUT - U_{DD} = U_{IN} = OV$;

FR — a tápfeszpont és/vagy a bemenetek szabadon hagyva, illetve ellenálláson, keresztül OV -ra kötve.

Az IC állapotára jellemző, mérhető paraméterek:

U_{TN} — az n -csatorna küszöbfeszültsége $I_{DD} = 20 \mu A$ mellett;

U_{TP} — a p -csatorna küszöbfeszültsége $I_{DD} = 20 \mu A$ mellett;

I_Q — nyugalmi áram $U_{IN} = OV$ mellett;

I_D — tápáramfelvétel $U_{IN} = 100$ kHz-es négyszögjel mellett;

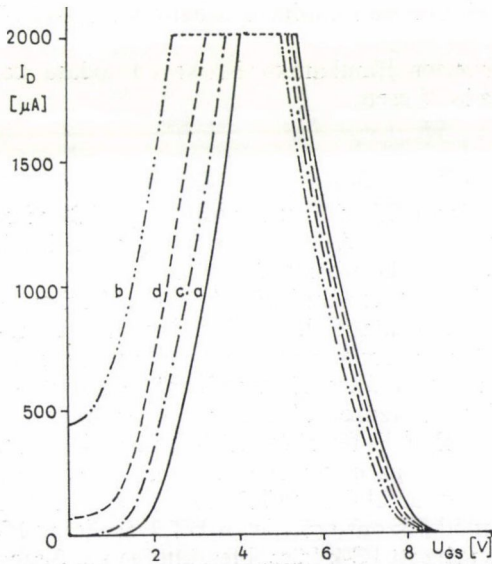
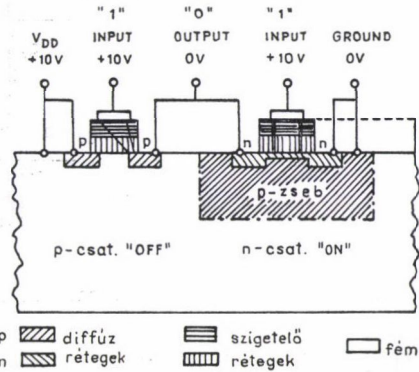
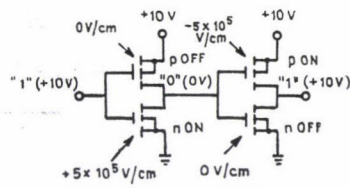
$I_{DD} = f(U_{IN})$ — áramkarakterisztika.

Mérési eredmények:

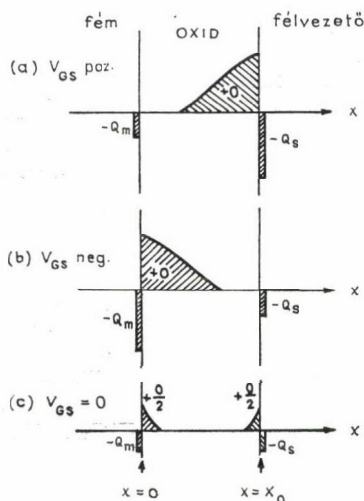
1. Alapinverter vizsgálata

Egy CMOS inverter logikai sémája és keresztmetszete (Al-gate, tömbi Si) a 4. ábrán látható [3]. NS gyártmányú, CD 4007 CN típusú invertereket H, L és IN üzemmódban sugároztunk be. A besugárzás hatására bekövetkezett áramkarakterisztika eltolódást az 5. ábra szemlélteti. A besugárzás alatt az inverterben uralkodó elektromos erőtér erősen befolyásolja a sugárválaszt. Az oxidrétegben befogódó töltések elhelyezkedésére legerősebben a $G-S$ erőtér hat [1]. Pozitív U_{GS} előfeszítés esetén a befogott lyukak a negatívabb substrate közelében halmozódnak fel, (6/a ábra) erőteljesen befolyásolja a vezető csatorna kialakulását, ezáltal nagy mértékű negatív eltolódást okoznak az n -csatorna áramkarakterisztikájában. Negatív U_{GS} esetén a befogott lyukak a negatívabb gate közelében halmozódnak fel (6/b ábra), kevésbé befolyásolja a vezető csatorna kialakulását és pozitív eltolódást okoznak a p -csatorna küszöbfeszültségében. $U_{GS} = 0$, tehát zárt csatorna esetén megszűnik a gate és a substrate közötti homogén erőtér, viszont fellép egy „oldalirányú” inhomogén erőtér a drain és a gate között. n -csatorna esetében $U_G = OV$ és $U_D = +V_{DD}$,

4. ábra. CMOS inverter logikai vázlata és keresztmetszete az előfeszítések és a szigetelő rétegben kialakuló elektromos erők fel-tüntetésével



5. ábra. Inverter áramkarakterisztika eltolódása besugárzás hatására (a) — besugárzás előtti áramkarakterisztika (b), (c), (d) — $D = 16,6$ krad tolaldózis utáni áramkarakteristikák, besugárzás alatti üzemmódjuk H, L, illetve IN



6. ábra. Töltéeloszlás
a gate-oxidban besugárzás után

tehát az oxidrétegben befogódó pozitív töltések a gate felé tolódva halmozódnak fel, negatív irányba tolják el a küszöb feszültséget, de kisebb mértékben, mint pozitív gate előfeszítés esetén. p -csatorna esetében $U_G = +V_{DD}$ és $U_D = 0V$, a töltések a drain közelében halmozódnak fel, eléggé kiszámíthatatlan hatást gyakorolva az áramkarakterisztika alakulására. NS és RCA gyártmányú eszközknél azt tapasztaltuk, hogy a p -csatorna áramkarakterisztikája H üzemmódú ($p-OFF$) besugárzás után erősebben eltolódott balra, mint L üzemmódú ($p-ON$) besugárzás után.

Az IN üzemmódban besugárzott inverter áramkarakterisztika eltolódása kb. a H és L üzemmódú inverterek eltolódása közé esett.

2. Egyszerű kapu IC-k vizsgálata

36 db RCA és 10 db Motorola gyártmányú CD 4000-es sorozatú kapu IC-t vizsgáltunk különböző besugárzás alatti üzemmódban. A küszöb feszültség eltolódások és az ebből számítható határdózisok a 3. és 4. táblázatban találhatók.

A 3. táblázat az IN és OUT üzemmódban besugárzott RCA IC-k mérési eredményeit hasonlítja össze. Az átlagértékekből az látszik, hogy nincs jelentős különbség az azonos típusokra számolt átlagok és az egész sorozatra számolt átlag között. Ez abból adódik, hogy az IC-k közel azonos számú tranzisztorból épülnek fel (20–24), csak a funkcionális felépítésük más. A sugárérzékenységet alapvetően a technológia és az elemsűrűség határozza meg, a funkcionális felépítés befolyása nem jelentős. (Egy elemi NOR kapcsolat érzékenyebb ugyan az n -csatorna küszöb feszültségének eltolódására, mint a NAND kapcsolat, de ez az eltérés eltűnik az egyedek közötti szórásban. [4]) A besugárzás alatti üzemmód viszont erőteljesen befolyásolja az IC sugártűrését. A kikapcsolt állapotban besugárzott IC-k küszöb feszültsége kb. 3-szor

3. TÁBLÁZAT

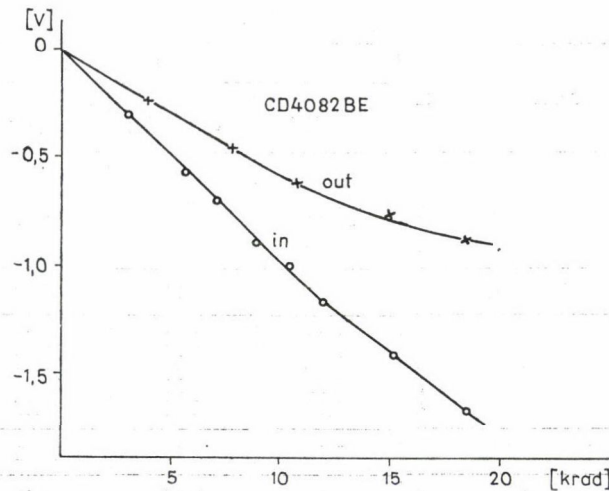
Üzem mód	IC típus	№	Paraméterek			
			$\Delta U_{TN}[V]$ $D=10 \text{ krad/Si}$	$\Delta U_{TP}[V]$ $D=10 \text{ krad/Si}$	$D(\Delta U_{TN}=1V)$ [krad/Si]	$\frac{D A_{max}}{U_{TN}=0V}$ [krad/Si]
IN (8 bem.)	CD 4068 BE	1	1,11	0,1	8,82	16,41
		2	1,18	—	8,22	15,50
		3	0,99	0,18	10,14	16,61
		7	0,91	0,35	10,97	—
	CD 4068 BE átl.		1,05	0,21	9,54	16,17
IN (8 bem.)	CD 4081 BE CD 4081 BD	1	1,01	0,19	9,95	17,70
		1	1,00	0,20	9,99	16,55
		2	0,92	0,21	11,00	18,46
		4	0,88	0,30	11,55	18,56
	CD 4081 B.. átl.		0,95	0,22	10,62	17,82
IN (1 bem.)	CD 4001 BE CD 4081 BD CD 4071 BE	1	0,94	0,16	10,80	18,40
		5	0,97	0,33	10,43	19,34
		1	1,08	0,25	9,22	18,95
IN (4 bem.)	CD 4082 BE	1	0,99	0,22	10,11	19,65
		6	0,96	0,22	10,47	20,80
	CD 40.. B átl.		1,00	0,23	10,13	18,08
OFF	CD 4081 BD CD 4081 BE CD 4071 BE CD 4068 BE CD 4082 BE	3	0,50	0,26	39,73	> 50*
		4	0,65	0,28	22,87	> 32
		5	0,56	0,35	34,05	> 35*
		4	0,43	0,28	37,81	~ 100
		3	0,69	0,27	~ 20	> 20*
		7	0,56	0,24	~ 30	> 30*
	CD 40.. B.. átl.		0,57	0,28	30,74	—

Megjegyzés: * — a mérést a *-gal jelölt dózisértékig végeztük.

4. TÁBLÁZAT

Üzem mód	IC-típus	№	Paraméterek			
			$\Delta U_{TN}[V]$ $D=10 \text{ krad/Si}$	$\Delta U_{TP}[V]$ $D=10 \text{ krad/Si}$	$D(\Delta U_{TN}=1V)$ [krad/Si]	$\frac{D A_{max}}{U_{TN}=0V}$ [krad/Si]
H (1 bem.)	CD 4071 BE CD 4081 BD	4	1,51	0,23	6,17	12,10
		7	1,44	0,25	7,35	11,42
	CD 40.. B.. átl.		1,48	0,24	6,76	11,76
L (1 bem.)	CD 4071 BE CD 4081 BD	2	0,7	0,19	> 16*	> 16*
		3	0,75	0,16	16,05	> 30*
		6	0,5	—	> 18*	> 18*
	CD 40.. B.. átl.		0,65	0,18	~ 17	—

Megjegyzés: * — a mérést a *-gal jelölt dózisértékig végeztük.



7. ábra. Küszöbfeszültségeltolódás besugárzás alatti IN és OUT üzemmódban

akkora dózissal tolódott el 1 V-ot, mint a 100 kHz-es 1:1-es kitöltési tényezőjű négyszögjellel működtetett IC-ké.

A küszöbfeszültség eltolódás dózisfüggése is egészen más a kétféle üzemmódban, amint ezt a 7. ábra mutatja.

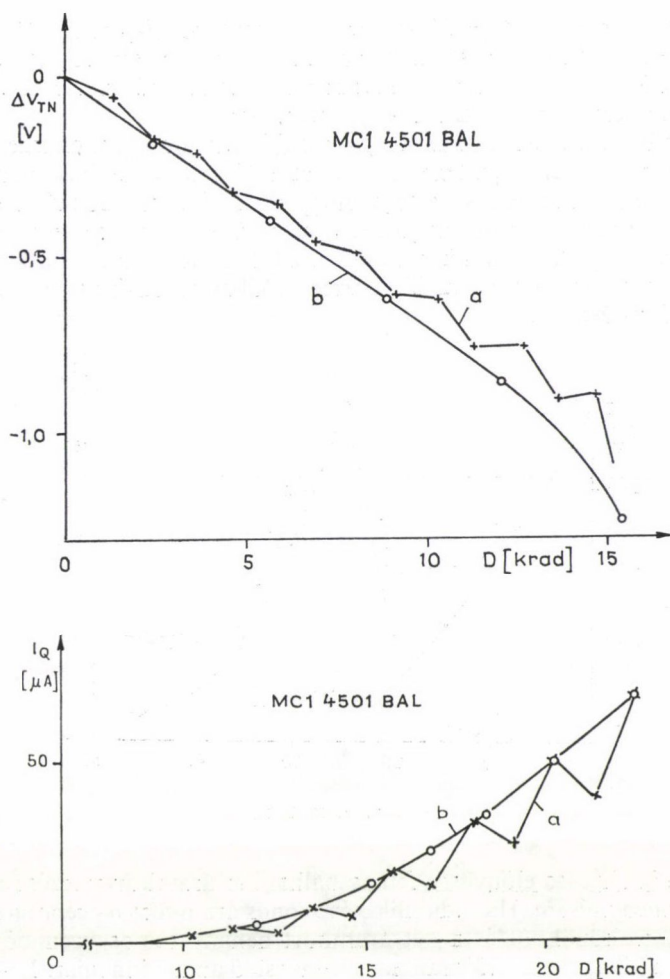
A H és L üzemmódban besugárzott IC-k mérési eredményeit a 4. táblázat tartalmazza. Ha az itt látható küszöbfeszültség eltolódásokat összehasonlítjuk az IN üzemmódban besugárzott azonos típusú IC-k küszöbfeszültség eltolódásával, a következő észrevételeket tehetjük:

- az L és H üzemmódhoz tartozó ΔU_{TN} értékek számtani átlaga nagyobb, mint az IN üzemmódhoz tartozó ΔU_{TN} ;
 - ΔU_{TP} esetében az IN üzemmódhoz tartozó érték nagyobb;
 - mindkét esetben az ΔU_T (IN) közelebb esik ΔU_T (L)-hez, mint ΔU_T (H)-hoz.
- Ez az összefüggés az annealing jelenségével magyarázható.

3. Annealing vizsgálat

A gate-oxidba befogódott pozitív töltések nem rögzülnek véglegesen, termikusan vagy külső erőter hatására elmozdulhatnak és mozgás közben rekombináldhatnak. Ezzel csökken a befogódott töltések száma, javulnak az IC paraméterei [5]. A termikus annealing akkor jelentkezik, ha megszüntetjük a besugárzást és az IC-t hosszabb ideig tároljuk. Az annealing alacsony hőmérsékleten lassabban, magasabb hőmérsékleten gyorsabban megy végbe. [13]

Az annealing másik formája úgy jön létre, hogy a besugárzás változatlan marad, de megváltoztatjuk az eszközre ható $G-S$ erőteret. Pl. ha pozitív U_{GS} után $U_{GS} = -OV$ -ra kapcsolunk át, azok a töltések, amelyek eddig a SiO_2 -Si határfelület közelében halmozódtak fel, a megváltozott erőter hatására elmozdulhatnak a fém- SiO_2 határfelület irányába. Útközben rekombináldhatnak, ezt a rekombinációt a be-



8. ábra. Küszöbfeszültségeltolódás és nyugalmi áram változás alternáló bementi jel esetén

sugárzás is segíti a friss ionizációból származó elektronokkal. Átkapcsolás után az annealing és az új előfeszítésnek megfelelő töltésbefogódás együttesen határozzák meg a paraméterek változását.

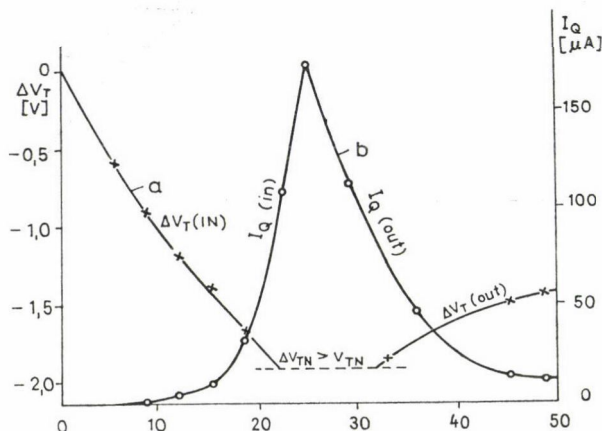
Az IN üzemmód 100 kHz-es négyszögjele nem egyéb, mint egy alternáló jel-sorozat. Az alternáló jelre adott sugárválasz gyakorlatilag frekvenciafüggetlen, tehát lassabban váltott jelekkel ki lehet nagyítani, hogy mi is történik négyszög bemenőjel esetén. A 8. ábra az MC 14 501 IC küszöbfeszültségének és nyugalmi áramának változását mutatja különböző idejű alternáló jelek hatására:

„a” görbe — jelváltás 5 percenként;

„b” görbe — jelváltás 10 μs -onként ($f = 100$ kHz).

A lassú alternáló jeleket $U_{GS}=0V$ -al kezdtük, ezzel az U_{TN} és I_Q változása „lema-
radt” a 100 kHz-es jelhez képest. Ezért van az, hogy az alternáló jelek görbéje alul-
ról közelíti a 100 kHz-es jel görbét. Az annealing hatása különösen az n -csatornánál
jelentős, mivel ez érzékenyebb az ionizáló sugárzásra.

Az annealing átkapcsolás után a leggyorsabb, később egyre csökken a meredek-
sége. Az IC paraméterei közelítenek az eredeti értékükhöz, de bizonyos határon túl
annyira lecsökken a változás sebessége, hogy csak végtelen idő múlva érné el az IC
azokat. A 9. ábra ilyen annealinggörbét mutat küszöbfeszültség eltolódásra (a) és
nyugalmi áramra (b). Az IC IN üzemmódról OUT üzemmódra lett átkapcsolva, vál-
tozatlan dózisteljesítmény mellett. OUT üzemmódban az IC-k összes elemi invertere
 $U_{GS}=0V$ előfeszítést kap.



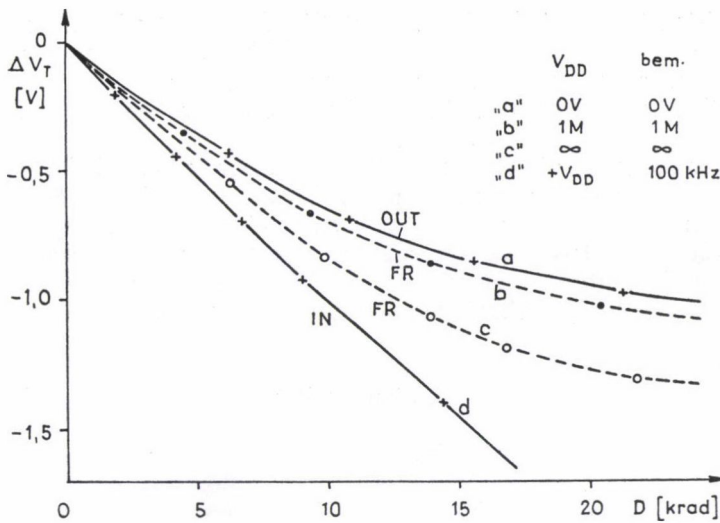
9. ábra. Annealing

Az annealing hatása előnyösen felhasználható az áramkörtervezés során a beren-
dezés sugárkeményítésére. Ha tudniillik két azonos áramkört megépítünk kommersz,
„unhardened” eszközökből és a két áramkört néhány sec-os üzemi idővel felváltva
működtetjük, a kikapcsolási időszakban érvényesülő annealing miatt 1,5–2-szeresére
nő az áramkör sugártűrése, ami adott esetben pl. 1,5-szeres hibamentes repülési időt
jelenthet.

4. Szabadon hagyott bemenetek hatása

Néhány RCA gyártmányú IC-t besugároztunk FR üzemmódban, azaz olyan
kikapcsolt állapotban, amikor az eszköz tápfeszültség- és földpontja, illetve a be-
menetek és a földpont között nem volt galvanikus kapcsolat. Ezeknek az IC-knek
a küszöbfeszültségettolódása hasonló IC-k IN és OUT üzemmódú sugárválaszával
összevetve, a 10. ábrán látható.

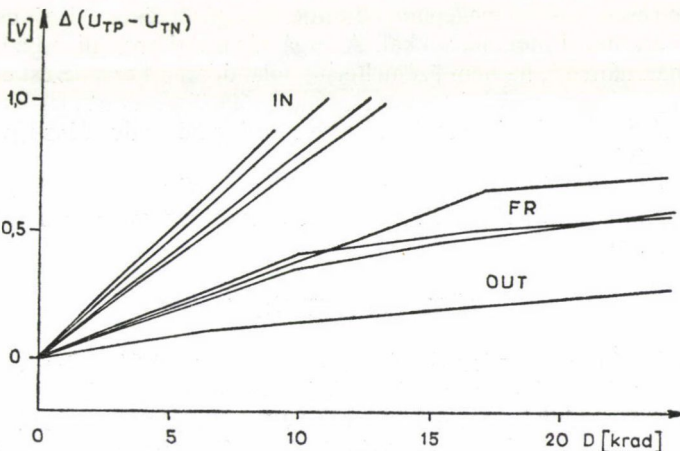
A küszöbfeszültségettolódás görbéje szabadon hagyott bemenetek esetén is
„OUT”-jellegű, de a paraméterromlás mértéke erőteljesebb, kb. az IN és OUT
üzemmódú paraméterromlás között félfúton helyezkedik el. Ezenkívül áramfelvétel
instabilitás is észlelhető a szabad bemenettel besugárzott IC-k mérésénél. Egy pél-



10. ábra. Küszöbfeszültségeltolódás különböző üzemmódban besugározott IC-knél „a” — OUT üzemmód; „b” — FR üzemmód, a tápfeszültségpont és a bemenetek 1 M ohmos ellenállással a substrate-hoz kötve; „c” — FR üzemmód, a tápfeszültségpont és a bemenetek szabadon; „d” — IN üzemmód

dánynál ez az instabilitás hirtelen áramfelvétel növekedésbe ment át és az IC véglegesen tönkrement, olyan totáldózis értéknél, amit egyébként az IC-nek működtetve is funkcionális hiba nélkül kellett volna elviselnie.

Az erős paraméterromlást és a hirtelen tönkremenetetelt valószínűleg a statikus feltöltődéshez hasonló töltésfelhalmozódás okozza.



11. ábra. V_{TN} és V_{TP} közötti távolság változása besugárzás hatására IN, OUT és FR üzemmódban besugározott IC-knél

Ezek a jelenségek egyértelműen azt mutatják, hogy sugárzó környezetben különös gondot kell fordítani arra, hogy a kikapcsolt IC-k tápfeszültségpontja és bemenetei a substrate-tal azonos potenciálra kerüljenek. Ellenkező esetben a kikapcsolt állapot nem tudja kifejteni frissítő hatását, sőt kedvezőtlen esetben még tönkre is teheti az IC-t.

A tápfeszültségpont, illetve a bemenetek és a substrate közötti ohmos kapcsolatnak nem kell feltétlenül rövidzárnak lenni. RCA gyártmányú IC-knél kb. 1 M ohm az a felső határ, ami még jó kapcsolatot biztosít és tulajdonképpen elegendő, ha a bemenetek egyértelműen le vannak kötve, ebben az esetben a tápfeszültségpont szabadon maradhat. A 11. ábra mutatja a CD 4081 BE típusú IC sugárválasztát különböző bemenet—földpont és tápfeszültségpont—földpont összekötések esetén.

Sugárkeményítés

Űreszközök tervezése során a készülő berendezés sugárérzékenységét összhangba kell hozni a program során várható kozmikus sugárdózissal. Amennyiben az első durva becslésekből az derül ki, hogy kommersz alkatrészekből, redundancia nélkül megépítve a berendezés D_{Amax} értéke alacsonyabb az űrben várható totáldózisnál, akkor a tervezőnek választania kell a rendszer „keményítésére” szolgáló különböző lehetőségek közül:

1. Növelni kell a berendezés árnyékolását. Ez szinte biztos, hogy súlynövekedést jelent, ami kedvezőtlen, mert űreszközöknél elég szűkösen vannak kiszabva a súlyhatárok.
2. Keményített, úgynevezett hardened IC-ket kell alkalmazni a berendezésben. Ez komoly ártóbbletet jelent, pl. az RCA „Z” sorozata, amelynél 10^5 rad/Si D_{Amax} értéket garantál a cég, a katonai IC-khez viszonyítva kb. 10-szeres, a kommersz IC-khez viszonyítva kb. 100-szoros áron kerül forgalomba. Néhány cég szállít 10^6 rad/Si határdózisú IC-ket is, természetesen igen magas áron.
3. Unhardened eszközökből megépített berendezés sugárérzékenysége is csökkenthető különböző áramkörü megoldásokkal. A sugárzás alatti annealing kedvező hatása igen jól kihasználható, ha nem üzemeltetjük állandóan a berendezést és kikapcsolt állapotban gondoskodunk a bemenetek és a tápfeszültségpont megfelelő lekötéséről. Működés közben is kihasználható az annealing két redundáns egység alternatív működtetésével.

Méréseink azt mutatják, hogy a statikus H állapot erősebb paraméterromlást idéz elő, mint az alternáló jelű működtetés. Az áramkörü tervezés során ezt sem árt figyelembe venni.

KÖVETKEZTETÉSEK

Az RCA és Motorola gyártmányú CD 4000B sorozatú SSI IC-k 15—20 krad/Si totáldózis értékig elfogadható paraméterekkel működnek, funkcionálisan pedig csak 80—100 krad/Si fölött hibáznak. A CMOS SSI IC-k általában nem kritikus eszközök sugárérzékenység szempontjából. Az MSI és LSI IC-k viszont komplexitásuk arányában egyre érzékenyebbek, ezek részletes elemzésével cikkünk II. része foglalkozik.

IRODALOM

1. *A. L. Barry, D. F. Page*, Radiation hardening of MOS transistors for low ionizing dose levels. IEEE Trans. NS—13, NO. 6, december 1966., 255.
2. *W. Poch, A. G. Holmes-Siedle*, Permanent radiation effects in complementary-symmetry MOS integrated circuits IEEE Trans. NS. december 1969., 227.
3. *W. J. Poch, A. G. Holmes-Siedle*, The long-term effects of radiation on complementary MOS logic networks. IEEE Trans. NS. december 1970., 33.
4. *R. A. Burghard, C. W. Gwyn*, Radiation failure modes in CMOS integrated circuits. IEEE Trans NS. december 1973., 300. old.
5. *D. H. Habing, B. D. Shafer*, Room temperature annealing of ionization-induced damage in CMOS circuits. IEEE Trans. NS. december 1973., 307.
6. *R. A. Cliff, V. Danchenko*, Prediction and measurement of radiation damage to CMOS devices on board spacecraft. IEEE Trans. NS—23, No. 6, december 1976., 1781.
7. *J. P. Raymond, A. R. Hart*, Radiation design handbook for the Jupiter probe, 1977.
8. *A. G. Stanley, K. E. Martin*, Voyager electronic parts radiation program. JPL publ. 77—41, Vol. 1.
9. *A. Holmes-Siedle R. F. A. Freeman*, Improving radiation tolerance in space-borne electronics. IEEE Trans. NS—24, No. 6., december 1977., 2259.
10. *A. J. Matteucci, M. F. Schneider*, Radiation testing complementary (symmetry) metal oxide semiconductor (CMOS) arrays for satellites. IEEE Trans. NS—24, No. 6, december 1977., 2285.
11. *E. G. Stassinopoulos, V. Danchenko*, Prediction and measurement results of radiation damage to CMOS devices on board spacecraft. IEEE Trans. NS—24, No. 6, december 1977., 2289.
12. *D. K. Myers*, What happens to semiconductors in a nuclear environment? Electronics/March 16, 1978., 131.
13. *V. Danchenko, E. G. Stassinopoulos*, Activation energies of thermal annealing of radiation-induced damage in *n*- and *p*-channels of CMOS integrated circuits. IEEE Trans. NS—27, No. 6, december 1980., 1658.

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó és Nyomda főigazgatója
Műszaki szerkesztő: Sándor István
A kézirat a nyomdába érkezett: 1985. jan. 22. — Terjedelem: 8,05 (A/5 iv)
86-326 — Szegedi Nyomda, Szeged — F. v.: Surányi Tibor igazgató

TARTALOM

<i>Rózsa Károly: Gáz- és fémgőzlézerek céljára alkalmazott üreges katódú kisülések</i>	1
<i>Horváth Márton: A negatív abszolút hőmérsékletek néhány sajátága</i>	57
<i>Bereczkiné Kerényi Ilona: Integrált áramkörök sugárérzékenysége, I.</i>	77

307.226

IV.

9

h

MAGYAR

FIZIKAI FOLYÓIRAT

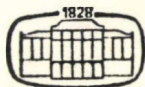
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXIV. KÖTET

2. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1986

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet
1444 Budapest VIII., Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 120 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 388), külföldi megrendelések a KULTURA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

NO GO TÉTELEK A BELSŐ SZIMMETRIÁK ÉS A POINCARÉ-CSOPORT EGYESÍTÉSÉRE

HUSZÁR MIKLÓS

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

Az uniter szimmetriák és a téridő Poincaré szimmetriájának egyesítésére tett kísérletek nehézségbe ütköztek, míg végül a 60-as években több tételt sikerült bizonyítani, mely arra mutatott, hogy bizonyos feltételek mellett ilyen egyesítés csak triviális módon valósítható meg. Ezekről a tételekről lesz szó.

Amíg az uniter szimmetriák közül csak az $SU(2)$ izospin csoport volt ismert, úgy képzelték, hogy az izotérbeli transzformációk függetlenek a téridő transzformációktól és viszont, azaz a teljes csoport az izospin- és Poincaré-csoport direkt szorzata, $G = SU(2) \otimes P_+^4$. Alapvetően megváltozott a helyzet az $SU(3)$ felfedezésével. Most is feltehetjük, hogy az erős kölcsönhatások szimmetriája $G = SU(3) \otimes P_+^4$, könnyű azonban belátni, hogy ez — az izospinhez hasonlóan — azonos tömegű $SU(3)$ multipletteket eredményez. Az $SU(3)$ csoport F_a generátora speciálisan P_μ -vel felcserélhető, ezért egy multiplett két, m_1 és m_2 tömegű tagja közt $0 = \langle m_1 | [P^2, F_a] | m_2 \rangle = (m_1^2 - m_2^2) \langle m_1 | F_a | m_2 \rangle$, ezért vagy $m_1 = m_2$, vagy az $SU(3)$ generátorok mátrixeleme zérus bármely két multiplett tag közt.

Ha tömegformulát akarunk kapni feltesszük, hogy a tömegoperátor egy $SU(3)$ szimmetrikus és egy megfelelő módon transzformálódó részből áll,

$$m = m_0 + m_1 = m_0 + c_1 F_8 + c_2 D_8,$$

ahol F_a egy $\lambda_a (a=1, \dots, 8)$ szerint transzformálódó tenzor, $D_8 = d_{8ab} F_a F_b$ és d_{cab} a szimmetrikus struktúra-állandó [1]. Itt azonban nyilván ellentmondásba kerülünk azzal a feltevéssel, hogy a teljes szimmetria a Poincaré-csoport és $SU(3)$ direkt szorzata, mivel egy relativisztikus elméletben $m^2 = P_\mu P^\mu$ így nincs módunk megszabni az $SU(3)$ sértő tagot. Mint láttuk $[P^2, F_a] = 0$ miatt egyáltalán nincs is tömegfelhasadás, tehát az $SU(3)$ sértő tagnak ilyen keretek közt relativisztikusan nincs is értelme. Ezt az ellentmondást úgy oldották fel, hogy feltették, hogy az $SU(3)$ alapvetően nemrelativisztikus, a szimmetria csak a hadron nyugalmi rendszerében érvényes. A kvarkok bár nagy tömegdefektussal vannak kötve, a fennálló dinamikai helyzet következtében csak kis impulzussal mozognak a hadronokban. A tömegfelhasadás egy $SU(3)$ neminvariáns kölcsönhatási Hamilton-operátor következménye. Hasonló a helyzet, mint egy atomban, ahol nemrelativisztikusan v/c rendben a spinforgás $SU(2)$ csoportja és a pályamomentum $O(3)$ csoportja külön-külön szimmetria, de nagyobb sebességeknél, v^2/c^2 rendben a spin-pálya kölcsönhatás felhasítja az $SU(2) \otimes O(3)$ multipletteket. Ily módon az $SU(3)$ -at statikus szimmetriának tekintve az elmélet konzekvens, bár továbbra is felmerül annak igénye, hogy a szimmetriát majd valahogyan mozgó rendszerbe tudjuk transzformálni és ezzel relativisztikusan invariáns elméletet hoz-

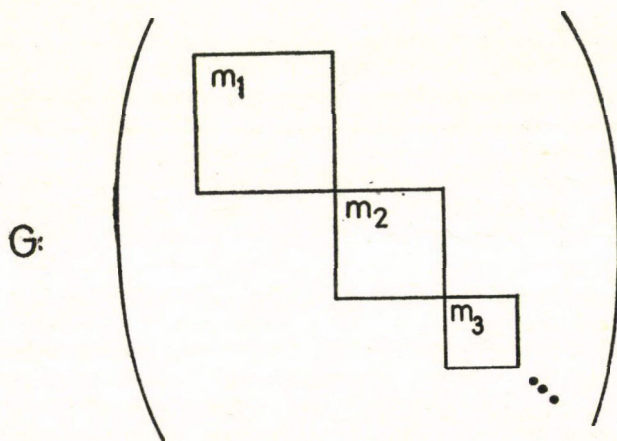
zunk létre. Azt gondolhatnánk, hogy a relativisztikus szimmetria felkutatása nem nehéz, mivel ha megadunk egy mennyiséget — például a belső szimmetriát — a nyugalmi rendszerben és annak Lorentz-transzformációs tulajdonságát (ami a Lorentz-csoport generátoraira való csererelációk megadásával egyenértékű), akkor az illető mennyiség bármely mozgó rendszerben meghatározott. Az egyik no go tétel (McGlinn—O’Raifeartaigh) tartalma éppen az, hogy bizonyos feltételek mellett a belső szimmetria szükségképpen Lorentz-skalár és ez arra vezet, hogy a szimmetria-algebra a Poincaré-algebra és a belső szimmetria direkt összege, így tömegfelhasadást ismét nem lehet elérni.

A belső szimmetriák és a relativisztikus szimmetria összeütközése még nyilvánvalóbb az $SU(6)$ esetében, mely a spinforgás $SU(2)$ csoportjának és $SU(3)$ -nak egy kibővítése. Az $SU(6)$ azonban egzakt spinmegmaradást foglal magába és bár feltehetjük, hogy a hadronon belül a mozgás nemrelativisztikus, maguk a hadronok alapvetően relativisztikusan mozognak, így itt már a relativisztikus szimmetriával a konfrontáció elkerülhetetlen: relativisztikusan a spin külön nem mozgásálló, ezért az $SU(6)$ olyan reakciókat enged meg, melyek a valóságban nem mehetnek végbe. Lényegében nem segített ezen az $SU(6)$ olyan $SU(6)_w$ -nek nevezett átértelmezése, mely tetszőleges impulzusú egyirányú mozgást lehetővé tesz, de másirányút nem. Ennek ellenére az $SU(6)$ nem érdektelen, mert segítségével mágneses momentumok közti összefüggések adhatók meg, melyek jó egyezésben vannak a tapasztalattal.

A fenti megfontolások azt mutatták, hogy elkerülhetetlen a téridő és belső szimmetriák összeegyeztetésének problémája. Tegyük fel, hogy létezik egy nagy G csoport, mely alcsoportként tartalmazza a Poincaré-csoportot és a belső szimmetriát.

Ekkor G egy irreducibilis ábrázolását kiredukálva a Poincaré-csoport (P_+^\dagger) szerint esetleg tömegspektrumot lehetne nyerni. A tárgyalásra kerülő no go tételek alapvető tartalma éppen az, hogy *nem lehet G kiredukálásával különböző diszkrét tömeget kapni.*

Tulajdonképpen nincs olyan fizikai elv, mely megkövetelné, hogy egy nagy G csoport irreducibilis ábrázolását tekintsük. Erre csupán a hidrogénatom példája nyújt



1. ábra. Egy P_+^\dagger -t tartalmazó G csoport irreducibilis ábrázolásának feltételezett kiredukálása P_+^\dagger -ábrázolások szerint

támpontot. A Runge—Lenz-vektor megmaradása megszünteti az egy energiához tartozó véletlen degenerációt és egy E_n energiához tartozó sajátállapotok $O(4)$ egy irreducibilis ábrázolását alkotják. Tekinthesük azonban az $O(4, 2)$ spektrumgeneráló csoportot, mely ugyan nem szimmetria, de egy irreducibilis ábrázolásában tartalmazza a különböző E_n energiához tartozó $O(4)$ altereket. Ez az analógia azonban nem érvényes a relativisztikus szimmetriára, mert mint említettük az $O(4)$ helyett a Poincaré-csoportot feltételezve nem lehet tömegspektrumot nyerni.

1. O'RAIFEARTAIGH TÉTELE

A tétel így hangzik [2]:

Legyen L véges Lie-algebra, melynek részalgebrája a P_+^+ Poincaré-algebra. Legyen L ábrázolása adva egy \mathcal{H} Hilbert-téren oly módon, hogy az impulzus négyzete, $P^2 = P_\mu P^\mu$, valamint ennek minden véges hatványa önadjungált. Ha létezik egy diszkrét m^2 pont P^2 spektrumában, akkor az ehhez tartozó $|m\rangle$ altér zárt és az L Lie-algebrára vonatkozóan invariáns.

Mindjárt jegyezzük meg, hogy a tétel némi pontosítást igényel, erre a bizonyítás után visszatérünk.

A tétel tartalma lényegében a következő: tegyük fel, hogy az L algebra irreducibilis ábrázolásait alkotó vektorok a \mathcal{H} Hilbert-téren $|m; \xi\rangle$ alakban írhatók, ahol P^2 sajátértéke m^2 , ξ pedig az összes többi kvantumszám. Ha J_L a Lie-algebra ábrázolása, akkor a tétel szerint $J_L|m; \xi\rangle$ ugyancsak P^2 -nek m^2 sajátértékhez tartozó sajátvektora, ezért $\langle m'; \xi' | J_L | m; \xi \rangle = 0$, tehát különböző tömegek közt az algebrának nincs nemeltűnő mátrixeleme. Ez éppen azt jelenti, hogy L irreducibilis ábrázolása csak egyetlen tömeget tartalmazhat, tehát az 1. ábrán vázolt helyzet nem valósulhat meg.

Idézzük a Poincaré-csoport Lie-algebráját:

$$[M_{\mu\nu}, M_{\alpha\beta}] = -i(g_{\mu\alpha}M_{\nu\beta} + g_{\nu\beta}M_{\mu\alpha} - g_{\mu\beta}M_{\nu\alpha} - g_{\nu\alpha}M_{\mu\beta}) \quad (1)$$

$$[M_{\mu\nu}, P_\sigma] = i(g_{\nu\sigma}P_\mu - g_{\mu\sigma}P_\nu) \quad (2)$$

$$[P_\mu, P_\nu] = 0 \quad (\mu, \nu = 0, 1, 2, 3; g_{00} = 1). \quad (3)$$

Mint látni fogjuk ezek közül (1)-re nem is lesz szükség.

Előbb belátjuk a következő lemmát:

Ha $J_L \in L$, akkor elég nagy n -re

$$[P_{\mu_1}[P_{\mu_2}[P_{\mu_3} \dots [P_{\mu_n}, J_L] \dots]] = 0.$$

Ha J_A az L Lie-algebra egy bázisa, akkor fennállnak a

$$[J_A, J_B] = C^D_{AB} J_D$$

egyenlőségek. Az adjungált ábrázolás egy $J \in L$ elemhez rendelt $J \rightarrow \hat{J}$ lineáris operátor L -ben, mely definíció szerint $\hat{J}J_A = [J, J_A]$ alakban hat J_A -ra. (Használatos még a $\hat{J} \equiv \text{ad } J$ jelölés is.) Ez azt jelenti, hogy ha $J = a^A J_A$, akkor \hat{J} mátrixa az adott bázisban $\hat{J} \rightarrow a^A C^D_{AB}$, speciálisan $\hat{J}_A \rightarrow C^D_{AB}$.

Ennek felhasználásával

$$\begin{aligned}
 [P_{\mu_n}, J_L] &= \hat{P}_{\mu_n} J_L = (\hat{P}_{\mu_n})^A_L J_A, \\
 [P_{\mu_{n-1}}[P_{\mu_n}, J_L]] &= \hat{P}_{\mu_{n-1}}(\hat{P}_{\mu_n})^A_L J_A = (\hat{P}_{\mu_{n-1}}\hat{P}_{\mu_n})^A_L J_A, \\
 \text{Így végül} \quad [P_{\mu_1}[P_{\mu_2} \dots [P_{\mu_n}, J_L] \dots]] &= (\hat{P}_{\mu_1}\hat{P}_{\mu_2} \dots \hat{P}_{\mu_n})^A_L J_A. \quad (4)
 \end{aligned}$$

Belátható az adjungált ábrázolás következő tulajdonsága:

$$[\widehat{J_A, J_B}] = [\hat{J}_A, \hat{J}_B]. \text{ Ezt (2)-re alkalmazva}$$

$$[\widehat{M_{\mu\nu}, P_\sigma}] = [\hat{M}_{\mu\nu}, \hat{P}_\sigma] = i(g_{\nu\sigma}\hat{P}_\mu - g_{\mu\sigma}\hat{P}_\nu).$$

Legyen $\sigma = \nu$ és $\mu \neq \nu$, ekkor ebből

$$[\hat{M}_{\mu\nu}, \hat{P}_\nu] = i g_{\nu\nu} \hat{P}_\mu \quad (\mu \neq \nu)$$

következik. Hasonló módon (3)-ból adódik a

$$[\hat{P}_\mu, \hat{P}_\nu] = 0$$

egyenlőség.

Ezekből $\mu \neq \nu$ esetén

$$[\hat{M}_{\mu\nu} P_\mu, P_\nu] = i g_{\nu\nu} \hat{P}_\mu \hat{P}_\mu$$

következik. Hasonlóan

$$[\hat{M}_{\mu\nu} \hat{P}_\mu \hat{P}_\mu, \hat{P}_\nu] = i g_{\nu\nu} \hat{P}_\mu \hat{P}_\mu \hat{P}_\mu, \dots$$

$$[\hat{M}_{\mu\nu} (\hat{P}_\mu)^{n-1}, \hat{P}_\nu] = i g_{\nu\nu} (\hat{P}_\mu)^n, \quad (\mu \neq \nu).$$

Tehát P_μ adjungált ábrázolásának minden hatványa, mint egy kommutátor állítható elő. Tekintve, hogy végesdimenziós mátrixokról van szó, ebből következik, hogy

$$Sp(\hat{P}_\mu)^n = 0 \quad (n = 1, 2, \dots).$$

Ez viszont azt jelenti, hogy \hat{P}_μ mátrixának karakterisztikus egyenlete

$$(\hat{P}_\mu)^N = 0, \quad (5)$$

ahol N a \hat{P}_μ dimenziója.* Ebből az adódik, hogy a (4) egyenlet

$$[P_{\mu_1}[P_{\mu_2} \dots [P_{\mu_n}, J_L] \dots]] = (\hat{P}_{\mu_1}\hat{P}_{\mu_2} \dots \hat{P}_{\mu_n})^A_L J_A$$

jobb oldalán álló mennyiség is zérus elég nagy n -re, mivel legfeljebb $N-1$ darab P_0 és ugyanennyi $\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3$ szerepelhet, eggyel több \hat{P}_μ faktor esetén valamelyik \hat{P}_μ

* Legyen egy A mátrix karakterisztikus egyenlete

$$\text{Det}(\lambda - A) = \lambda^N + \alpha_1 \lambda^{N-1} + \dots + \alpha_{N-1} \lambda + \alpha_N \quad \text{és} \quad S_k \equiv Sp(A^k),$$

akkor α_k -ra érvényes a következő rekurzió

$$\alpha_k = -\frac{1}{k} \left(S_k + \sum_{l=1}^{k-1} S_{k-l} \alpha_l \right).$$

Mivel $S_k = 0$ ($k = 1, 2, \dots$), ebből $\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_n = 0$ következik.

már az N -edik hatványon jelenik meg, ami (5) szerint zérus. Tehát $n \equiv 4(N-1)+1 = 4N-3$ esetén

$$[P_{\mu_1}[P_{\mu_2} \dots [P_{\mu_n}, J_L] \dots]] = 0. \quad (6)$$

Ebből könnyű belátni, hogy elég nagy n -re

$$[P^2[P^2[P^2 \dots [P^2, J_L] \dots]]] = 0 \quad (7)$$

is teljesül.

Még egy egyszerű segédtétele lesz szükség:

Ha A lineáris és A^n önadjungált operátor a \mathcal{H} Hilbert-térben és van $|h\rangle$, hogy $A^n|h\rangle=0$, akkor $A|h\rangle=0$.

Legyen $2^m > N$, akkor a feltevés miatt $A^{2^m}|h\rangle=0$. Azonban egy B önadjungált operátornak mindig van önadjungált négyzetgyöke és B értelmezési tartománya \sqrt{B} értelmezési tartományában van. Ezért $\sqrt{A^{2^m}}=A^{2^{m-1}}$ önadjungált, tehát

$$\langle A^{2^{m-1}}h | A^{2^{m-1}}h \rangle = \langle h | A^{2^m} | h \rangle = 0$$

a skalárszorzat pozitív definitása miatt ebből $A^{2^{m-1}}|h\rangle=0$ következik. Az eljárást ismételve $A|h\rangle=0$ egyenletre jutunk, ami az állítás volt.

Ezután a tétel bizonyítása nyilvánvaló. Jelöljük \mathcal{H}_m -el a P^2 operátor m^2 sajátértékhez tartozó alterét. Mivel minden önadjungált operátor sajáttere zárt, ezért P^2 sajáttere is zárt.

Legyenek a \mathcal{H}_m altér vektorai $|m\rangle$ -ek, ezekre tehát $(P^2 - m^2)|m\rangle=0$. A (7) alatti egyenletből

$$[P^2[P^2 \dots [P^2, J_L] \dots]]|m\rangle = (P^2 - m^2)^N(J_L|m\rangle) = 0.$$

A 2. lemma felhasználásával ebből:

$$(P^2 - m^2)(J_L|m\rangle) = 0. \quad (8)$$

Azaz $J_L|m\rangle \in \mathcal{H}_m$, tehát egyetlen generátor sem vezet ki a \mathcal{H}_m altérből. Ez a tétel állítása.

Tekintsünk ezután egy relativisztikus szimmetriához tartozó multiplettet, azaz tekintsük az L Lie-algebrának — mely tartalmazza a Poincaré-csoportot — egy irreducibilis ábrázolását. Mint a bevezetőben említettük, ésszerű megkövetelni, hogy egy multiplettet az L algebra egy irreducibilis ábrázolása alkosson. Ebből viszont az O'Raifeartaigh tétel miatt következik, hogy egy multiplett csak azonos tömegű részecskéket tartalmazhat.

A tétel nagyon általános és tisztán szimmetria-megfontolásokat tartalmaz, tehát lehet mögötte bármilyen bonyolult dinamika, csak az kell, hogy a Lie-algebrai relációk, mint operátor egyenlőségek teljesüljenek. Még az sem szükséges, hogy a feltételezett L algebra az S -mátrix szimmetriája legyen. A tétel természetesen nem tiltja meg, hogy L különböző irreducibilis ábrázolásaiban különböző tömegeket találjunk.

A tétel szigorú matematikai értelemben némi pontosítást tett szükségessé. A (8) egyenlet szerint $(P^2 - m^2)J_L|m\rangle=0$. Ebből azonban nem következik, hogy a \mathcal{H}_m altér invariáns. J_L -el szemben, mert nem biztos, hogy J_L értelmezési tartománya

sűrű \mathcal{H}_m -ben. Ennek figyelembevételével a pontosan bizonyítható tétel így hangzik [3]:

„Legyen G végesdimenziós összefüggő Lie-csoport, melynek P_+ analitikus alcsoportja. Legyen U G -nek folytonos ábrázolása és P_μ a négyesimpulzus operátora. Legyen P_μ spektruma $\{0\} \cup V_+$ -ban, ahol V_+ a jövő-fénykúp. Legyen $M = (P_\mu P^\mu)^{1/2}$ -nek $m > 0$ izolált sajátértéke, akkor M sajáttere invariáns G -vel szemben.”

* * *

Egy érdekes no go tételt talált és bizonyított be McGlinn [4]. Eredeti alakjában ez így hangzik:
McGlinn tétele.

Legyen L Lie-algebra, melynek bázisa a P_+ Poincaré-csoport és egy belső félig-egyszerű S szimmetria-csoport Lie-algebráinak bázisvektoraiból áll. Feltesszük továbbá, hogy a belső szimmetria-algebra felcserélhető az $M_{\mu\nu}$ Lorentz-generátorokkal, $[S, M_{\mu\nu}] = 0$. Ekkor az L Lie-algebra két felcserélhető részalgebra direkt összegére esik szét: $L = P_+ \oplus S$.

Tehát nincsen a Poincaré-algebrának nemtriviális kibővítése, ha csak egy belső szimmetria-csoport bázisa használható fel a bővítéshez. A tétel feltevése szerint a belső kvantumszámok — mint a töltés, izospin, hipertöltés — Lorentz-invariánsak és ez maga után vonja a belső szimmetria-generátoroknak a P impulzussal való felcserélhetőségét is, azaz tömegfelhasadásról megint nem lehet szó.

A tételt általánosította O’Raifeartaigh [5] aki kimutatta, hogy a tétel akkor is igaz, ha nem tételezzük fel S és M felcserélhetőségét. Mielőtt az élesített tételt bizonyítjuk néhány Lie-algebrai fogalomra és tételre lesz szükség [6].

2. NÉHÁNY LIE-ALGEBRAI TÉTEL

1. Legyen $L_1 \subset L$, ahol L Lie-algebra. L ideál, ha $[L, L_1] \subseteq L_1$. Az ideál az invariáns alcsoport Lie-algebrai megfelelője. Például a Minkowski-tér T_a eltolásai invariáns alcsoportot képeznek a Poincaré-csoportban: $T_L^{-1} T_a T_L = T_{a'}$, ahol T_L Lorentz-transzformáció. Ebből az infinitezimális generátorokra $[M, P] = P$, $[P, P] = 0$, azaz P ideál.

Egy algebra egyszerű, ha nincs nemtriviális ideálja és féligegyszerű, ha nincs kommutatív ideálja.

2. A Lie-algebra relációk jobb oldalán általában nem az egész Lie-algebra jelenik meg, azaz $[L, L] = L^{(1)}$, ahol $L^{(1)} \subset L$. $L^{(1)}$ a derivált algebra. A második, ... n -edik derivált algebrát $[L^{(1)}, L^{(1)}] = L^{(2)}$, $L^{(2)} \subset L^{(1)} \subset L$... definiálja. Egy Lie-algebra megoldható, ha $[L^{(n)}, L^{(n)}] = 0$ elég nagy n -re. Megjegyezzük, hogy a féligegyszerű és megoldható algebra komplementer fogalmak: megoldható algebra nem féligegyszerű és viszont. Szükség lesz a következő tételre ([6], 397. old.):

Az L algebra akkor és csak akkor féligegyszerű, ha nem tartalmaz megoldható ideált.

3. Lévi tétele. Bármely Lie-algebra felbontható két vektortér direkt összegére, melyek egyike féligegyszerű (\mathcal{M}), másika egy maximális megoldható ideál (\mathcal{P}):

$L = \mathcal{M} + \mathcal{P}$. Ezeket másszóval *Lévi-faktornak* (\mathcal{M}) és *radikálnak* (\mathcal{P}) nevezzük. Tehát minden Lie-algebra ilyen szerkezetű:

$$[\mathcal{M}, \mathcal{M}] = \mathcal{M}, \quad [\mathcal{M}, \mathcal{P}] = \mathcal{P}, \quad [\mathcal{P}, \mathcal{P}] = \mathcal{P}^{(1)}.$$

A jelöléssel arra akarunk utalni, hogy a Poincaré-csoport Lévi-felbontásában a Lévi-faktor éppen az $M_{\mu\nu}$ Lorentz-generátor és a radikál a P_μ négyes-impulzus.

4. *Malcev—Harish-Chandra tétel.* Legyen \mathcal{M}_1 féligegyszerű részalgebra L -ben és legyen L Lévi-felbontása $L = \mathcal{M} + \mathcal{P}$, akkor van olyan hasonlósági transzformáció

$$\mathcal{M}'_1 = e^{-L} \mathcal{M} e^L,$$

hogy \mathcal{M}'_1 teljesen a Lévi-faktorban legyen, $\mathcal{M}'_1 \subseteq \mathcal{M}$, ezért egy féligegyszerű részalgebra mindig a Lévi-faktorba tartozónak tekinthető.

Ezután rátérünk a McGlinn tételre, mely O'Raifeartaigh által élesített fogalmazásban így hangzik [5]:

3. MCGLINN TÉTELE

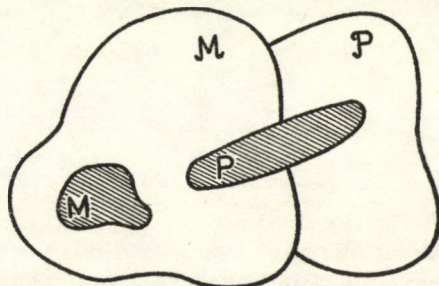
Legyen L Lie-algebra, melynek bázisa a P^\dagger_+ Poincaré-csoport és egy féligegyszerű S csoport Lie-algebrájának bázisából áll, akkor az L két (felcserélhető) Lie-algebra összegére esik szét, $L = P^\dagger_+ \oplus S$.

A Lévi-tétel miatt L felbontható egy Lévi-faktorra és egy radikálra: $L = \mathcal{M} + \mathcal{P}$. A 4. pontban említett Malcev—Harish-Chandra tétel miatt feltehető, hogy a Lorentz-csoport \mathcal{M} -nek alcsoportja, $M \subset \mathcal{M}$. Jelöljük a Poincaré-csoport generátorait az egyszerűség kedvéért $M_{\mu\nu} \rightarrow M$, $P_\mu \rightarrow P$ -vel, ekkor a Lie-algebra szerkezetéről a következőket tudjuk:

$$(a): [\mathcal{M}, \mathcal{M}] = \mathcal{M}; \quad (b): [\mathcal{M}, \mathcal{P}] = \mathcal{P}; \quad (c): [\mathcal{P}, \mathcal{P}] = 0;$$

$$(a'): [\mathcal{M}, \mathcal{M}] = \mathcal{M}; \quad (b'): [\mathcal{M}, \mathcal{P}] = \mathcal{P}; \quad (c'): [\mathcal{P}, \mathcal{P}] = \mathcal{P}^{(1)};$$

és (d): $M \subset \mathcal{M}$. Itt tehát \mathcal{M} féligegyszerű, \mathcal{P} megoldható ideál. Ez diagramban így szemléltethető:

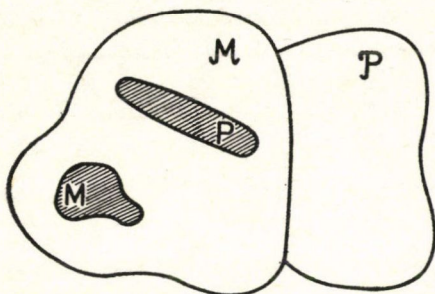


2. ábra. A Poincaré-algebra, melyet vonalkázással jelöltünk, így helyezkedhet el az L algebraiban

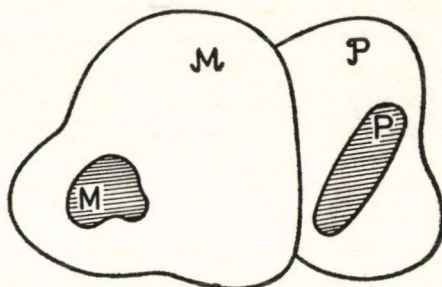
Tekintsük \mathcal{P} és P metszetének zárójelét M -mel. Ekkor (b) és (b') szerint

$$[M, \mathcal{P} \cap P] = \mathcal{P} \cap P.$$

Mivel azonban a P_μ impulzusoknak nincs olyan valódi altere, mely ideált alkotna a Poincaré-algebrában, ezért csak két lehetőség van: 1. $\mathcal{P} \cap P = 0$, ekkor P teljesen M -be tartozik. 2. $\mathcal{P} \cap P = P$, ekkor P teljesen \mathcal{P} -ben van, azaz P nem lóghat át M -ből \mathcal{P} -be, ahogy ezt a 2. ábrán feltüntettük. A két lehetőséget a 3. és 4. ábra mutatja.

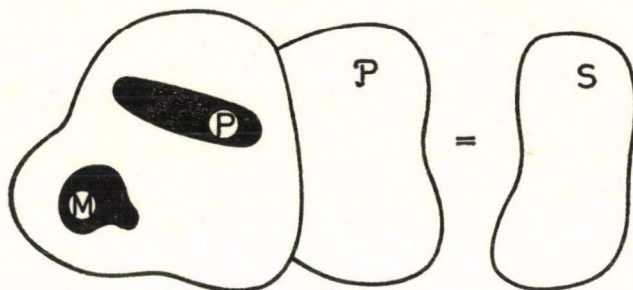


3. ábra. 1. lehetőség: az impulzus generátorok M -be tartoznak



4. ábra. 2. lehetőség: az impulzus generátorok \mathcal{P} -be tartoznak

Távolítsuk el az 1. esetben M -et és P -t (5. ábra). Jelöljük M -nek M és P eltávolítása után kapott elemeit M_0 -al: $M_0 = M - (M + P)$. Tudjuk azonban, hogy a tétel feltevése szerint az így fennmaradó $M_0 + \mathcal{P} = S$ egy féligegyszerű algebra kell legyen.



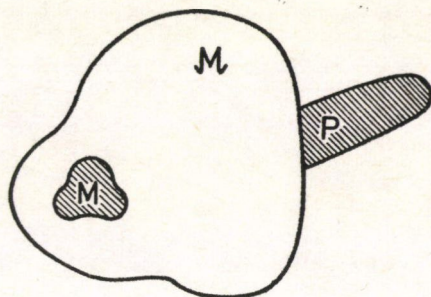
5. ábra. M és P eltávolításával egy féligegyszerű S algebra kell, hogy maradjon

A Lie-algebra most így alakul:

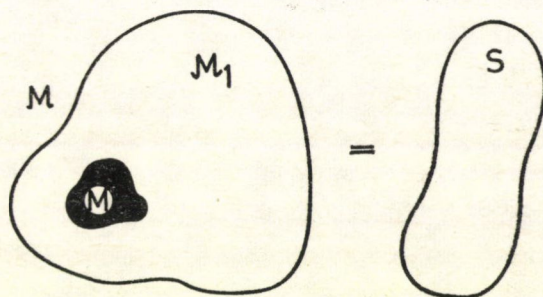
$$[M_0, M_0] = M_0, [M_0, \mathcal{P}] = \mathcal{P}, [\mathcal{P}, \mathcal{P}] = \mathcal{P}^{(1)}. \quad (9)$$

A 2. pontban említett tétel szerint egy Lie-algebra csak akkor féligegyszerű, ha nem tartalmaz megoldható ideált. Márpedig a Lévi-tétel miatt \mathcal{P} megoldható ideál, ami ellentmond annak, hogy S féligegyszerű. Tehát a 3. ábrán feltüntetett eset nem valósulhat meg, marad a 4. ábrán vázolt lehetőség. Ha megint elhagyjuk M -et és P -t és megismétljük az előbbi gondolatmenetet, akkor a (9) egyenlet következtében ismét

ellentmondásba kerülünk S féligegyszerű tulajdonságával, hacsak \mathcal{P} nem azonos P -vel (6. ábra), hiszen mihelyt \mathcal{P} -nek van P eltávolítása után fennmaradó nemzérus altere, (9) miatt S nem lehetne féligegyszerű. Ez esetben tehát S teljesen \mathcal{M} -ben fekszik. Jelöljük ezután \mathcal{M} -nek M kihagyásával fennmaradó részét \mathcal{M}_1 -el, $\mathcal{M}_1 = \mathcal{M} - M$, akkor a feltevés szerint $\mathcal{M}_1 = S$.

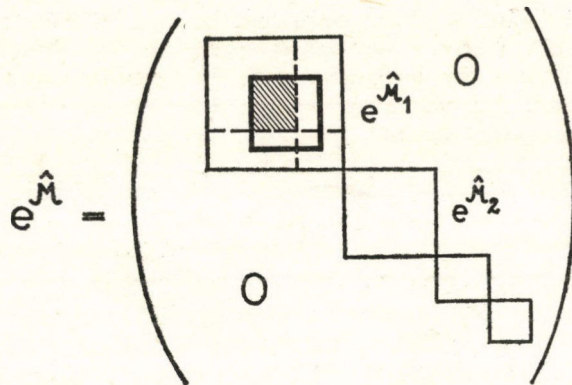


6. ábra. A Lie-algebra egyetlen lehetséges szerkezete



7. ábra. M kihagyásával fennmaradó \mathcal{M}_1 megegyezik az S algebrával

Adva van tehát egy féligegyszerű Lie-algebra, melynek részalgebrája az M Lorentz-algebra és az úgyszintén féligegyszerű S algebra úgy, hogy M és S bázisa \mathcal{M} teljes bázisát alkotja. Belátjuk, hogy ekkor $[M, S] = 0$. Tekintsük \mathcal{M} adjungált ábrázolását, $g(\mathcal{M}) \equiv e^{\hat{\mathcal{M}}}$. Ismeretes, hogy féligegyszerű algebra adjungált ábrázolása mindig teljesen reducibilis, azaz megfelelő bázisban blokkdiagonális alakra transzformálható [6]. Szorítkozzunk most a $g(M) = e^{\hat{M}}$ alcsoportra. Ekkor $e^{\hat{\mathcal{M}}}$ egy irreducibilis komponense – pl. $e^{\hat{\mathcal{M}}_1}$ – általában reducibilis lesz. Ugyanez a helyzet, ha a $g(S) = e^{\hat{S}}$ adjugált ábrázolásra szorítkozunk. Könnyű belátni, hogy a két alcsoport szerinti redukció nem fedheti át egymást, mert akkor lenne egy valódi altér, mely $g(M)$ -re és $g(S)$ -re, azaz $g(\mathcal{M})$ -re invariáns lenne, ami nem lehet. Marad tehát az a két lehetőség, hogy a két alcsoport szerinti redukció alterei egyáltalán nem fedik egymást, vagy metszetük egy egész irreducibilis $e^{\hat{\mathcal{M}}_1}$ tér. Könnyen megmutatható, hogy az utóbbi lehetőség nem állhat fenn. Tehát $[e^{\hat{M}}, e^{\hat{S}}] = 0$, amiből $[\hat{M}, \hat{S}] = 0$ következik.



8. ábra. Az $e^{\hat{M}}$ adjungált ábrázolás $e^{\hat{M}}$, illetve $e^{\hat{S}}$ szerinti redukciója

Az eddigiek alapján a Lie-algebra:

$$[M, M] = M \quad [M, P] = P \quad [P, P] = 0$$

$$[M, S] = 0 \quad [S, P] = P_1 \subseteq P \quad [S, S] = S.$$

Használjuk fel ezek közül az $[\hat{M}, \hat{S}] = 0$ relációt. Az $\hat{M}\hat{S}$ operátor mind az S alteret, mind az M alteret zérusba viszi át $(\hat{M}\hat{S})S = \hat{M}[S, S] = \hat{M}S = [M, S] = 0$, $(\hat{M}\hat{S})M = \hat{M}[S, M] = 0$. Ugyanígy látható be, hogy ez az $\hat{S}\hat{M}$ operátorra is igaz, tehát $[\hat{M}, \hat{S}]$ -nek legfeljebb P -re való hatása lehetne nemzérus. Használjuk fel az $[M, P] = P$ relációt, ami részletesen $[M_{\mu\nu}, P_\sigma] = i(g_{\nu\sigma}P_\mu - g_{\mu\sigma}P_\nu)$ alakban írható. Legyen $M = \frac{1}{2} \varphi^{\mu\nu} M_{\mu\nu}$, ahol $\varphi^{\mu\nu}$ antiszimmetrikus tenzor, akkor ezzel

$$\hat{M}P_\sigma = [M, P_\sigma] = i\varphi^\mu_\nu P_\mu.$$

Ugyanígy $S = \sigma^a S_a$ -val

$$\hat{S}P_\sigma = [S, P_\sigma] = \hat{S}^\mu_\sigma P_\mu.$$

Ezekből

$$0 = [\hat{M}, \hat{S}]P_\sigma = (\varphi^\mu_\alpha \hat{S}^\alpha_\sigma - \hat{S}^\mu_\alpha \varphi^\alpha_\sigma)P_\mu.$$

Könnyű ellenőrizni, hogy tetszőleges φ^μ_ν -vel felcserélhető \hat{S}^μ_ν csak az egységmátrix konstansszorosa lehet, $\hat{S}^\mu_\nu = \mu(\sigma)\delta^\mu_\nu$, speciálisan $(\hat{S}_a)^\mu_\nu = \mu_a \delta^\mu_\nu$, azaz $\hat{S}_a P = \mu_a P$. Ebből $[\hat{S}_a, \hat{S}_b]P = 0$ adódik. Mivel az S algebra féligegyszerű $\text{Det } g_{ab} = \text{Det } \text{Sp}(\hat{S}_a \hat{S}_b) \neq 0$, ezért létezik g_{ab} -nek g^{ab} inverze. Felhasználjuk, hogy a spur felcserélhetősége miatt $\text{Sp}(\hat{S}_c[\hat{S}_a, \hat{S}_b]) = \text{Sp}([\hat{S}_c, \hat{S}_a]\hat{S}_b)$, ezért $C^f_{ab}g_{fd} = C^f_{da}g_{fb}$. Ezt figyelembe véve az $[S_a, S_b] = C^d_{ab}S_d$ reláció megfordítható: $S_d = C^a_{df}g^{bf}[\hat{S}_a, \hat{S}_b]$. Ebből $[S_d, P] = \hat{S}_d P = C^a_{df}g^{bf}[\hat{S}_a, \hat{S}_b]P = 0$, azaz végül $[S, P] = 0$. Tehát a tétel feltételeiből következik, hogy M és S , sőt S és P is felcserélhető, ezért a teljes algebra csak a Poincaré- és belső algebra felcserélhető direkt összege lehet.

A bizonyításból kiderül, hogy ez a következmény azon múltott, hogy a teljes algebra bázisát csak a Poincaré-csoport és a belső szimmetria-csoport alkotta. Nem lehet tehát ily módon sem tömegfelhasadást kapni. Érdekes kérdés lehet még, hogy

mi történik, ha megengedünk egyéb generátorokat is a teljes csoportban. Kiderül, hogy a Poincaré-csoport elhelyezkedése ekkor is csak négy könnyen áttekinthető esetre korlátozódik. Ilyen részletes analízis [5]-ben található.

Fizikai szempontból mindenesetre ésszerű, hogy a multiplettek belső kvantum-számai algebrai okokból szükségszerűen Lorentz-invariánsak. Meg kell azonban mondani, hogy a McGlinn tétel következményeit tekintve nem jelent komoly korlátokat, mivel semmilyen fizikai elv nem tiltja újabb generátorok felhasználását.

4. EGYÉB NO GO TÉTELEK

Mivel egy multiplett tagjai egy féligegyszerű S belső szimmetria-algebra Cartan-féle H_a részalgebrájával vannak indexelve, ezért célszerű feltenni, hogy ezek Lorentz-invariánsak, azaz $[M, H_a] = 0$. Ebből a feltevésből következik, hogy a teljes csoport megint csak a Poincaré-csoport és S direkt összege lehet [7].

Említettük, hogy az eddig tárgyalt tételekben sehol nem volt kihasználva, hogy a tekintett algebra szimmetria. Egy S -mátrix elméletet feltételezve szimmetriának nevezhetjük a tekintetbe vett Hilbert-téren értelmezett U unitér operátort, ha a) Az S -mátrixszal felcserélhető. b) Egyrészecske állapotot egyrészecske állapotba visz át. c) Hatása több részecske állapoton, mint direkt szorzat van értelmezve.

Legyen ilyen értelemben U szimmetria-csoport és tegyük fel, hogy teljesül az alábbi 5 feltétel:

1. A Poincaré-csoport alcsoportja egy összefüggő G szimmetria-csoportnak.
2. Véges számú olyan részecske van, melynek tömege M -nél kisebb.
3. A két részecske $A(s, t)$ szórásamplitúdó a küszöbök fölül eltekintve analitikus s -ben és t -ben a fizikai tartomány valamely környezetében.
4. Bármely két részecske valóban szóródik, azaz $S|p_1, p_2\rangle \neq |p_1, p_2\rangle$.
5. G infinitezimális generátorai léteznek az impulzus térben és valamilyen Lorentz-tenzor indexszel rendelkező disztribúciók.

$S. Coleman$ és $J. Mandula$ kimutatta [8], hogy ezen feltételek teljesülése esetén G lokálisan izomorf a belső szimmetria-csoport és a Poincaré-csoport direkt szorzatával, tömegfelhasadás tehát ebben az esetben sem lehetséges.

IRODALOM

1. $M. Gell-Mann, Y. Ne'eman$: The Eightfold Way, W. A. Benjamin, Inc. kiadó, New York, 1964.
2. $L. O'Raifeartaigh$: Mass Differences and Lie Algebras of finite order, Phys. Rev. Lett. 14, 575, 1965.
3. $R. Jost$: Eine Bemerkung zu einem „Letter“ von L. O'Raifeartaigh etc. Helv. Phys. Acta 39, 369, 1966.
4. $W. D. McGlinn$: Problem of Combining Interaction Symmetries and Relativistic Invariance, Phys. Rev. Lett. 12, 467, 1964.
5. $L. O'Raifeartaigh$: Lorentz Invariance and Internal Symmetry, Phys. Rev. 139, B 1052, 1965.
6. $Д. П. Желобенко$: Компактные группы Ли и их представления (»Наука«, Москва, 1970).
7. $A. O. Barut, R. Raczka$: Theory of Group Representations and Applications (PWN, Warszawa, 1977).
8. $S. Coleman, J. Mandula$: All Possible Symmetries of the S-Matrix, Phys. Rev. 159, 1251, 1967.

SZUPERSZIMMETRIKUS LAGRANGE-FÜGGVÉNYEK

GÁLFI LÁSZLÓ

Eötvös Loránd Tudományegyetem Elméleti Fizikai Tanszék,
Budapest

1. SKALÁR ÉS VEKTOR SZUPERTEREK

Olyan Lagrange modelleket fogunk vizsgálni, amelyek skalár és vektor szupertereket tartalmaznak. Felidézzük ezek definícióit.

1.1. Skalár szupertérnek nevezzük az x négyeskoordinátának és a $\theta, \bar{\theta}$ spinor paramétereknek azt a $\Phi(x, \theta, \bar{\theta})$ függvényét, amely kielégíti a $\bar{D}_{\dot{\alpha}}\Phi = 0$ kovariáns mellékfeltételt. Itt

$$\bar{D}_{\dot{\alpha}} = -\frac{\partial}{\partial \bar{\theta}^{\dot{\alpha}}} - i\theta^{\alpha} \sigma_{\alpha\dot{\alpha}}^{\mu} \partial_{\mu},$$

és emlékeztetőül felírjuk a kétkomponensű Weyl-spinorok és a négykomponensű Majorana-spinorok közötti összefüggést:

$$\theta_W = \frac{1}{2}(1 - i\gamma_5)\theta_M, \quad \bar{\theta}_W = \frac{1}{2}(1 + i\gamma_5)\theta_M.$$

A $\Phi(x, \theta, \bar{\theta})$ függvényeket a spinor paraméterek szerint sorbafejtett alakjukkal értelmezzük. A mellékfeltételeket azért szabjuk ki, hogy a kifejtési együtthatók a szuperszimmetria algebra irreducibilis reprezentációját alkossák.

A mellékfeltételt az $y = x + i\theta\sigma\bar{\theta}$, $\theta, \bar{\theta}$ új változókban célszerű megoldani. Ezekben $\bar{D}_{\dot{\alpha}} = -\frac{\partial}{\partial \bar{\theta}^{\dot{\alpha}}}$, így

$$\Phi(y, \theta) = A(y) + \sqrt{2}\theta\psi(y) + \theta\theta F(y),$$

azaz Φ független a $\bar{\theta}$ ún. „jobbkezes” Weyl-spinortól, ezért szokás chirális, balkezes szupertérnek is nevezni. Az így kapott multipllett az A, F komplex skalár tereket és a ψ komplex Weyl-spinor teret tartalmazza. Ez a szuperszimmetria algebra legalacsonyabb (nem triviális) reprezentációja.

A Φ^+ szupertér a $D_{\alpha}\Phi^+ = 0$ kovariáns mellékfeltételt elégíti ki,

$$D_{\alpha} = \frac{\partial}{\partial \theta^{\alpha}} + i\sigma_{\alpha\dot{\alpha}}^{\mu} \bar{\theta}^{\dot{\alpha}} \partial_{\mu}.$$

Az $y^+ = x - i\theta\sigma\bar{\theta}$, $\theta, \bar{\theta}$ változókban $D_{\alpha} = \frac{\partial}{\partial \theta^{\alpha}}$, és

$$\Phi^+(y^+, \bar{\theta}) = A^*(y^+) + \sqrt{2}\bar{\theta}\bar{\psi}(y^+) + \bar{\theta}\bar{\theta}F^*(y^+)$$

a θ balkezes Weyl-spinortól független, chirális, jobbkezes szupertér. Könnyen bizonyíthatóak az alábbi állítások:

1. F, F^* szuperszimmetria transzformációnál teljes deriváltként transzformálódik, ezért Lagrange függvény építésre alkalmas.
2. A $\Phi_i \Phi_j, \Phi_i \Phi_j \Phi_k, \dots$ szorzatok maguk is chirális szuperterek.
3. $\Phi_i^+ \Phi_j$ nem chirális szupertér.
- 1.2. Vektor szupertérnek nevezzük azt a $V(x, \theta, \bar{\theta})$ függvényt, amely kielégíti a $V = V^+$ kovariáns mellékfeltételt. A spinor paraméterek szerint sorbafejtve:

$$\begin{aligned} V(x, \theta, \bar{\theta}) = & C(x) + i\theta\chi(x) - i\bar{\theta}\bar{\chi}(x) + \frac{i}{2}\theta\theta(M(x) + iN(x)) - \\ & - \frac{i}{2}\bar{\theta}\bar{\theta}(M(x) - iN(x)) - \theta\sigma^\mu\bar{\theta}V_\mu(x) + i\theta\theta\bar{\theta}\left[\bar{\lambda}(x) + \frac{i}{2}\bar{\sigma}^\mu\partial_\mu\chi(x)\right] - \\ & - i\bar{\theta}\bar{\theta}\theta\left[\lambda(x) + \frac{i}{2}\sigma^\mu\partial_\mu\bar{\chi}(x)\right] + \frac{1}{2}\theta\theta\bar{\theta}\bar{\theta}\left[D(x) + \frac{1}{2}\square C(x)\right]. \end{aligned}$$

A kapott multipllett a V_μ valós vektorteret, a λ, χ komplex Weyl-spinor tereket (valós Majorana-spinor tereket) és a C, D, M, N valós skalár tereket tartalmazza. Később látni fogjuk, hogy szuperszimmetrikus mértékinvariancia esetén χ, C, M, N nem fizikai szabadsági fokok, kitranszformálhatóak. Ismét könnyen bizonyítható az alábbi két állítás:

1. D szuperszimmetria transzformációnál teljes deriváltként transzformálódik, ezért Lagrange-függvény építésre alkalmas.
2. V hatványai vektor szuperterek.

2. SZUPERSZIMMETRIKUSAN ÁLTALÁNOSÍTOTT MÉRTÉKTRANSZFORMÁCIÓ

A később tárgyalásra kerülő mértékelméletek egyik alapproblémája, hogy a szokásos (Abeli)

$$V_\mu \rightarrow V_\mu + \partial_\mu A$$

mértéktranszformációt a szuperszimmetriával konzisztens módon ki kell terjeszteni. Erre a következő lépéseken keresztül juthatunk. A $\varphi = A + \sqrt{2}\theta\psi + \theta\theta F$ chirális szupertér felhasználásával képezzük a következő szuperteret:

$$\begin{aligned} i(\Phi - \Phi^+) = & i(A - A^*) + i\sqrt{2}(\theta\psi - \bar{\theta}\bar{\psi}) + i\theta\theta F - i\bar{\theta}\bar{\theta}F^* - \\ & - \theta\sigma^\mu\bar{\theta}\partial_\mu(A + A^*) - \frac{1}{\sqrt{2}}\theta\theta\bar{\sigma}^\mu\partial_\mu\psi + \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{\theta}\bar{\theta}\sigma^\mu\partial_\mu\bar{\psi} + \frac{i}{4}\theta\theta\bar{\theta}\bar{\theta}\square(A - A^*). \end{aligned}$$

Látható, hogy a kapott tér vektor szupertér. $-\theta\sigma^\mu\bar{\theta}$ együttthatója $\partial_\mu(A + A^*)$, ami sugallja, hogy a szuperszimmetrikusan általánosított mértéktranszformáció:

$$V \rightarrow V + i(\Phi - \Phi^+),$$

ahol V vektor szupertér, Φ, Φ^+ chirális szuperterek. A vektor szupertér komponenseinek transzformációs szabályai leolvashatóak:

$$C \rightarrow C + i(A - A^*),$$

$$\chi \rightarrow \chi + \sqrt{2}\psi,$$

$$M + iN \rightarrow M + iN + 2F,$$

$$V_\mu \rightarrow V_\mu + \partial_\mu(A + A^*),$$

$$\lambda \rightarrow \lambda,$$

$$D \rightarrow D.$$

Az első három összefüggésből látható, hogy szuperszimmetrikus mértékinvariancia esetén Φ megfelelő megválasztásával C, χ, M, N kitranszformálható. Azt a mértéket, amelyben ezek a komponensek eltűnnek, Wess—Zumino-mértéknek nevezik [3]. Rögzítése természetesen sérti a szuperszimmetriát:

$$V_{WZ}(x, \theta, \bar{\theta}) = -\theta\sigma^\mu\bar{\theta}V_\mu + i\theta\theta\bar{\theta}\bar{\lambda} - i\bar{\theta}\bar{\theta}\theta\lambda + \frac{1}{2}\theta\theta\bar{\theta}\bar{\theta}D.$$

A negyedik transzformációs összefüggés mutatja, hogy közönséges $V_\mu \rightarrow V_\mu + \partial_\mu a$ mértéktranszformáció WZ-mérték rögzítése esetén is végezhető (az, hogy C eltűnjön, csak $(A - A^*)$ -ot szabja meg). Az ötödik és hatodik összefüggés szerint λ és D szuperszimmetrikusan általánosított (Abeli) mértéktranszformációval szemben invariáns.

3. SZUPERSZIMMETRIKUS Φ^3 ELMÉLET [4]

A csak chirális szuperteret tartalmazó legáltalánosabb szuperszimmetrikus, renormálható Lagrange-függvény a következő:

$$L = \Phi_i^+ \Phi_i|_D + \left[\left(\frac{1}{2} m_{ij} \Phi_i \Phi_j + \frac{1}{3} g_{ijk} \Phi_i \Phi_j \Phi_k + \lambda_i \Phi_i \right)_F + \text{hermitikus konjugált} \right],$$

ahol a D és F indexek a multiplettek D és F komponenseit jelölik. m_{ij}, g_{ijk} indexeikben szimmetrikus paraméterek. Felírjuk a Lagrange-függvényt a multiplettek komponens tereivel kifejezve:

$$L = i\partial_\mu \bar{\psi}_i \bar{\sigma}^\mu \psi_i + A_i^* \square A_i + F_i^* F_i + \left[m_{ij} \left(A_i F_j - \frac{1}{2} \psi_i \psi_j \right) + g_{ijk} (A_i A_j F_k - \psi_i \psi_j A_k) + \lambda_i F_i + \text{h.c.} \right].$$

A kinetikus tagban $F_i^* F_i$ szerepel, ezért azt mondjuk, hogy F_i külső (nem fizikai) tér. Mozgásegyenlete:

$$0 = \frac{\partial L}{\partial F_k^*} = F_k + \lambda_k^* + m_{ik}^* A_i^* + g_{ijk}^* A_i^* A_j^*.$$

Csak a fizikai tereket tartjuk meg:

$$L = i\partial_\mu \bar{\psi}_i \bar{\sigma}^\mu \psi_i + A_i^* \square A_i - \left[\frac{1}{2} m_{ij} \psi_i \psi_j + g_{ijk} \psi_i \psi_j A_k + \text{h.c.} \right] - V,$$

$$V = V(A_i, A_i^*) = F_k^* F_k,$$

ahol F_k a mozgásegyenlet megoldása. Köbös, negyedfokú és Yukawa-típusú csatolások lépnek fel, így hatványszámolás szerint remélhető, hogy az elmélet renormálható. Itt jegyezzük meg, hogy a szuperszimmetrikus Φ^4 elmélet már hatványszámolás szerint is renormálhatatlan.

Az egyszerűség kedvéért legyen egyetlen $\Phi(A, \psi, F)$ chirális szupertér, és legyen $\lambda=0$. Használjuk most átmenetileg az

$$A \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(A - iB), \quad F \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(F + iG), \quad \psi_w \rightarrow \frac{1}{2}(1 - i\gamma_5)\psi_M$$

jelölést, ahol A, B, F, G valós terek, ψ_M Majorana-spinor. A Lagrange sűrűség:

$$L = L_0 + L_m + L_I,$$

ahol

$$L_0 = -\frac{1}{2}(\partial_\mu A)^2 - \frac{1}{2}(\partial_\mu B)^2 - \frac{1}{2}i\bar{\psi}\hat{\partial}\psi + \frac{1}{2}F^2 + \frac{1}{2}G^2,$$

$$L_m = m \left(FA + GB - \frac{1}{2}i\bar{\psi}\psi \right),$$

$$L_I = g(FA^2 - FB^2 + 2GAB - i\bar{\psi}\psi A + i\bar{\psi}\gamma_5\psi B).$$

A külső terek (F és G) kiküszöbölése után

$$L = -\frac{1}{2}(\partial A)^2 - \frac{1}{2}(\partial B)^2 - \frac{1}{2}i\bar{\psi}\hat{\partial}\psi - \frac{1}{2}m^2 A^2 - \frac{1}{2}m^2 B^2 - \frac{1}{2}im\bar{\psi}\psi - \\ - gmA(A^2 + B^2) - \frac{1}{2}g^2(A^2 + B^2)^2 - ig\Psi(A - \gamma_5 B)\psi.$$

Az utolsó három tag rendre a köbös, negyedfokú, ill. Yukawa csatolás. A szuperszimmetria következménye az, hogy egyetlen tömeg és egyetlen csatolási állandó szerepel. Nem nehéz összeszámolni, hogy szuperszimmetria megkövetelése nélkül három tömeg és két csatolási állandó lehetne. Bizonyítható, hogy a fenti Lagrange-függvény szuperszimmetrikus módon renormálható. A renormálás eredménye az, hogy nincs szükség sem lineáris ellentagra, sem tömeg ellentagra, és az, hogy a hullámfüggvény renormálási állandó és a tömeg renormálási állandó közös [5].

4. ABELI MÉRTÉKELMÉLET [3]

4.1. Wess—Zumino-mértékben

$$V_{wz}(x, \theta, \bar{\theta}) = -\theta\sigma^\mu\bar{\theta}V_\mu(x) + i\theta\theta\bar{\theta}\lambda(x) - i\bar{\theta}\bar{\theta}\theta\lambda(x) + \frac{1}{2}\theta\theta\bar{\theta}\bar{\theta}D(x),$$

$$V_{wz}^2 = -\frac{1}{2}\theta\theta\bar{\theta}\bar{\theta}V_\mu V^\mu,$$

$$V_{wz}^n = 0, \quad n > 2.$$

A térerősség szuperszimmetrikus általánosítottja:

$$W_\alpha = -\frac{1}{4}\bar{D}\bar{D}D_\alpha V, \quad \bar{W}_{\dot{\alpha}} = -\frac{1}{4}DD\bar{D}_{\dot{\alpha}}V.$$

Ezek chirális (spinor) szuperterek. A chiralitás, $\bar{D}W_\alpha=0$, ill. $D\bar{W}_{\dot{\alpha}}=0$ közvetlenül látható. A mértékinvariancia is könnyen bizonyítható, hiszen $\bar{D}\Phi=D\Phi^+=0$ miatt

$$W_\alpha \rightarrow -\frac{1}{4}\bar{D}\bar{D}D_\alpha(V+i\Phi-i\Phi^+) = W_\alpha - \frac{i}{4}\bar{D}\{\bar{D}, D_\alpha\}\Phi = W_\alpha.$$

Wess—Zumino-mértékben az $y=x+i\theta\sigma\bar{\theta}$ változóval

$$V = -\theta\sigma^\mu\bar{\theta}V_\mu(y) + i\theta\theta\bar{\theta}\lambda(y) - i\bar{\theta}\bar{\theta}\theta\lambda(y) + \frac{1}{2}\theta\theta\bar{\theta}\bar{\theta}(D(y) - i\partial_\mu V^\mu(y)),$$

$$W_\alpha = -i\lambda_\alpha(y) + \left[\delta_\alpha^\beta D(y) - \frac{i}{2}(\sigma^\mu\bar{\sigma}^\nu)_\alpha^\beta V_{\mu\nu}(y) \right] \theta_\beta + \theta\theta\sigma_{\alpha\dot{\alpha}}^\mu \partial_\mu \bar{\lambda}^{\dot{\alpha}}(y).$$

A W_α chirális (spinor) szupertér a mértékinvariáns D , λ_α , $V_{\mu\nu}=\partial_\mu V_\nu - \partial_\nu V_\mu$ komponenseket tartalmazza.

A Lagrange-függvény kinetikus része:

$$L_0 = \frac{1}{4}(W^\alpha W_\alpha + \bar{W}_{\dot{\alpha}}\bar{W}^{\dot{\alpha}})_F = -\frac{1}{4}V_{\mu\nu}^2 - \frac{1}{2}i\bar{\lambda}\sigma^\mu\partial_\mu\lambda + \frac{1}{2}D^2.$$

A Φ^3 elméletbeli F_i -hez hasonlóan D külső (nem fizikai) tér. Megjegyezzük, hogy nem zérus tömegű vektortér esetén a mértékinvariancia sérül, a Lagrange-függvény tömeg tagja:

$$L_m = m^2 V^2|_D =$$

$$= m^2 \left[-\frac{1}{2}V_\mu V^\mu - \chi\lambda - \bar{\chi}\bar{\lambda} + \frac{1}{2}(M^2 + N^2) - \frac{i}{2}\chi\sigma^\mu\partial_\mu\bar{\chi} - \frac{i}{2}\bar{\chi}\bar{\sigma}^\mu\partial_\mu\chi + \frac{1}{2}C\Box C + CD \right].$$

M , N , D külső (nem fizikai) terek. A szabadsági fokok száma megkétszereződött, mert V_μ tömeges, és χ , C új, fizikai terek. χ és λ Dirac-spinorba rendezhető.

4.2. Mértékinvariáns kölcsönhatás

A továbbiakban zérus tömegű vektorterekkel foglalkozunk. A mértékmultipllett fizikai terei a V_μ mérték bozon és a semleges spinor (gaugino). Az anyag multiplletteket chirális szuperterek formájában írjuk fel. Globális $U(1)$ transzformáció során a chirális multipllett transzformációja:

$$\Phi_l \rightarrow \Phi'_l = \exp(-it_l \lambda) \Phi_l,$$

ahol t_l , ill. λ az $U(1)$ töltés, ill. szög, valóság. Φ'_l is chirális szupertér, mert a konstans is az ($D_\alpha \lambda = \bar{D}_{\dot{\alpha}} \lambda = 0$). A chirális multipllettek

$$L = (\Phi_l^+ \Phi_l)_D + \left[\left(\frac{1}{2} m_{ij} \Phi_i \Phi_j + \frac{1}{3} g_{ijk} \Phi_i \Phi_j \Phi_k \right)_F + \text{h.c.} \right]$$

Lagrange-függvénye globális $U(1)$ transzformációval szemben invariáns, ha

$$m_{ij} = 0, \quad g_{ijk} = 0, \quad \text{ha} \quad t_i + t_j \neq 0, \quad t_i + t_j + t_k \neq 0.$$

Láttuk, hogy a szuperszimmetrikus, lokális $U(1)$ mértéktranszformációt egy Λ chirális szupertér segítségével írhatjuk fel:

$$\Phi_l \rightarrow \Phi'_l = \exp(-it_l \Lambda) \Phi_l, \quad \bar{D}_{\dot{\alpha}} \Lambda = 0,$$

$$\Phi_l^+ \rightarrow \Phi_l^{+'} = \exp(it_l \Lambda^+) \Phi_l^+, \quad D_\alpha \Lambda^+ = 0.$$

Ezzel a transzformációval szemben $\Phi_l^+ \Phi_l$ nem invariáns,

$$\Phi_l^{+'} \Phi'_l = \Phi_l^+ \Phi_l \exp(it_l (\Lambda^+ - \Lambda)).$$

Az invarianciát a vektor szupertér $V \rightarrow V' = V + i(\Lambda - \Lambda^+)$ transzformációs szabályát felhasználva állíthatjuk helyre. A lokális $U(1)$ transzformációval szemben invariáns Lagrange-függvény:

$$L = \frac{1}{4} (W^\alpha W_\alpha + \bar{W}_{\dot{\alpha}} \bar{W}^{\dot{\alpha}})_F + \Phi_l^+ \exp(it_l V) \Phi_l)_D + \\ + \left[\left(\frac{1}{2} m_{ij} \Phi_i \Phi_j + \frac{1}{3} g_{ijk} \Phi_i \Phi_j \Phi_k \right)_F + \text{h.c.} \right].$$

Első ránézésre azt gondolhatjuk, hogy ez a Lagrange-függvény az exponenciálisan tartalmazó tag miatt nem renormálható. Azonban a Wess—Zumino-mértékben:

$$\Phi^+ \exp(itV) \Phi|_D = FF^* + A \square A^* + i \partial_\mu \bar{\psi} \bar{\sigma}^\mu \psi + \\ + tV^\mu \left(\frac{1}{2} \bar{\psi} \bar{\sigma}^\mu \psi + \frac{i}{2} A^* \partial_\mu A - \frac{i}{2} \partial_\mu A^* \cdot A \right) - \\ - \frac{i}{\sqrt{2}} t(A \bar{\lambda} \psi - A^* \lambda \bar{\psi}) + \frac{1}{2} \left(tD - \frac{1}{2} t^2 V_\mu V^\mu \right) A^* A.$$

A kifejezés nem tartalmaz 4-nél magasabb hatványt. A speciális mértékválasztás következtében az explicit szuperszimmetria elvész, a renormálhatóság bizonyítása bonyolult. Megmutatták, hogy az elmélet 1-hurok közelítésben renormálható.

4.3. Superszimmetrikus kvantumelektrodinamika [3]

A kvantumelektrodinamika superszimmetrikus kiterjesztéséhez a V mérték-multiplette és két chirális multiplette van szükség, utóbbiakra azért, hogy az elektromos Dirac-spinorral lehessen leírni. Az S_1, S_2 chirális multiplettekből képezzük az $S_{\pm} = S_1 \pm iS_2$ komplex konjugált chirális multipletteket. Mértéktranszformációnál:

$$S_+ \rightarrow S'_+ = \exp(-ieA)S_+, \quad S_- \rightarrow S'_- = \exp(ieA)S_-,$$

ahol e az elektromos töltés. A Lagrange-függvény:

$$L_{QED} = \frac{1}{4}(W^a W_a + \bar{W}_a W^a)_F + (S_+^\dagger \exp(eV)S_+ + S_-^\dagger \exp(-eV)S_-)_D + 2m S_+ S_- |_F.$$

A fizikai terek a mértékmultipletben a V_μ vektortér, a foton és superszimmetrikus partnere a λ Majorana-spinor tér, amit fotonnak neveznek. Az anyag multiplettek fizikai terei a ψ_1, ψ_2 komplex Weyl-spinor terek, amelyek egy Dirac-spinorba rendezhetők, ez az elektron, és az A_1, A_2 komplex skalárterek, amelyek két töltött 0 spinű részecskét írnak le. Ezek az elektron superszimmetrikus partnerei, rájuk a selektron elnevezést használják.

5. NEM-ABELI MÉRTÉKELMÉLET [6]

Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy a mértékcsoport egyszerű. A chirális szuperterek lokális mértéktranszformációja:

$$\Phi \rightarrow \Phi' = \exp(-igA)\Phi, \quad \Phi^+ \rightarrow \Phi'^+ = \Phi^+ \exp(igA^+),$$

ahol a $A_{ij} = R_{ij}^a A_a$ mátrixjelölést használtuk, R_{ij}^a a mértékcsoport hermetikus generátorai a Φ chirális tér által definiált reprezentációban. A vektor szupertér transzformációja

$$\exp(gV') = \exp(-igA^+) \exp(gV) \exp(igA),$$

itt is a $V_{ij} = V_a T_{ij}^a$, $A_{ij} = A_a T_{ij}^a$ mátrixjelölést használtuk, ahol T_{ij}^a a vektor reprezentációbeli generátorok. A nem-Abeli jelleg miatt ez bonyolult (nem-lineáris) transzformáció. A A chirális szupertér 8 komponensének megfelelő megválasztásával a vektormultiplett C, χ, M, N komponensei kitranszformálhatók (és marad egy közönséges mértéktranszformáció). A nem-Abeli térerősség:

$$W_a = -\frac{1}{4} \bar{D} \bar{D} (\exp(-gV) D_a \exp(gV)).$$

Erről nem nehéz megmutatni, hogy chirális (spinor) szupertér. Mértéktranszformációja:

$$W_a \rightarrow W'_a = \exp(-igA) W_a \exp(igA).$$

A Lagrange-függvény kinetikus tagja:

$$L_0 = \frac{1}{4g^2} \text{Tr}(W^a W_a + \bar{W}_a \bar{W}^a)_F.$$

Szorítkozzunk arra az esetre, amikor a mértékcsoport $SU(N)$. A paritásörző kölcsönhatási tag és a tömegtag alakja hasonló, mint az Abeli elméletben:

$$(S_+^+ \exp(gV) S_+ + S_-^+ \exp(-gV) S_-)_D + [2m S_+ S_-]_F + \text{h.c.}.$$

Ha pl. S_+ az adjungált reprezentációhoz tartozik, akkor Wess—Zumino-mértékben a 3. pontban bevezetett valós térjelölést (és Majorana-spinorokat) használva:

$$L = \text{Tr} \left(-\frac{1}{4} V_{\mu\nu}^2 - \frac{1}{2} i \bar{\lambda} \hat{D} \lambda - \frac{1}{2} (D_\mu A)^2 - \frac{1}{2} (D_\mu B)^2 - \frac{1}{2} i \bar{\psi} \hat{D} \psi - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} m^2 (A^2 + B^2) - \frac{1}{2} i m \bar{\psi} \psi + g \bar{\lambda} [A + \gamma_5 B, \psi] + \frac{1}{2} g^2 [A, B]^2 \right),$$

ahol D_μ a kovariáns deriváltat jelöli. Megemlítjük még, hogy a renormálhatóság bizonyítása hasonló lépéseken keresztül történik, mint a közönséges nem-Abeli mérték-elméletben [7].

6. KITERJESZTETT ($N=2$) SZUPERSZIMMETRIKUS KVANTUMELEKTRODINAMIKA

Felépítjük a kvantumelektrodinamika $N=2$ kiterjesztett szuperszimmetrikus általánosítását, mint a legegyszerűbb kiterjesztett szuperszimmetriával rendelkező mértékelméletet [8]. Az $N=2$ kiterjesztett szuperszimmetrikus elméletben két lineárisan független szuperszimmetria algebra létezik, ezeket egy $O(2)$ belső szimmetriacsoport köti össze. $Q_{\alpha\uparrow}, Q_{\alpha\downarrow}$, legyen a kiterjesztett algebra egy bázisa, $\Sigma = \exp(i\pi I_3)$ az ezeket összekötő belső szimmetriatranszformáció. Az $N=2$ kiterjesztett algebrát az alábbi csererelációk, ill. transzformációs szabályok definiálják:

$$[\Sigma, M_{\mu\nu}] = [\Sigma, P_\mu] = 0, \\ \Sigma Q_{\alpha\uparrow} \Sigma^{-1} = Q_{\alpha\uparrow}, \quad \Sigma Q_{\alpha\downarrow} \Sigma^{-1} = -Q_{\alpha\downarrow}, \\ \{Q_{\alpha\uparrow}, Q_{\beta\uparrow}\} = \{\bar{Q}_{\alpha\uparrow}, \bar{Q}_{\beta\uparrow}\} = 0, \\ \{Q_{\alpha\uparrow}, \bar{Q}_{\beta\uparrow}\} = \{Q_{\alpha\downarrow}, \bar{Q}_{\beta\downarrow}\} = -2\gamma_{\alpha\beta}^\mu P_\mu, \\ [Q_{\alpha\uparrow}, P_\mu] = [Q_{\alpha\downarrow}, P_\mu] = [P_\lambda, P_\mu] = 0,$$

ahol $P_\mu, M_{\mu\nu}$ a Lorentz-csoport generátorai. Felírjuk a multiplettek komponenseinek transzformációs szabályait.

$$[Q_\uparrow, A] = i\psi, \quad [Q_\uparrow, B] = i\gamma_5 \psi, \\ \{Q_\uparrow, \bar{\psi}\} = [\hat{\partial}(-A + \gamma_5 B) + F + \gamma_5 G], \\ [Q_\uparrow, F] = i\hat{\partial}\psi, \quad [Q_\uparrow, G] = i\gamma_5 \hat{\partial}\psi, \\ [Q_\uparrow, V_{\mu\nu}] = i(\partial_\mu \gamma_\nu - \partial_\nu \gamma_\mu) \lambda, \\ \{Q_\uparrow, \lambda\} = \frac{1}{2} V_{\mu\nu} \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma_5 D, \\ [Q_\uparrow, D] = i\gamma_5 \hat{\partial}\lambda.$$

Ezekből az összefüggésekből látszik, hogy amíg egyetlen szuperszimmetria algebra van (Q_1), addig a skalár multipllett tagjai (A, B, ψ, F, G) és a vektor multipllett tagjai ($V_{\mu\nu}, \lambda, D$) csak egymás között transzformálódnak, a két multipllett nem keveredik egymással. Elő kell még írunk a komponens teret transzformációs tulajdonságait. Legyenek $A, B, V_{\mu\nu}$ szinglettek, λ és ψ egy dublett, G, F, D egy triplett tagjai:

$$\Sigma A \Sigma^{-1} = A, \quad \Sigma \psi \Sigma^{-1} = \lambda, \quad \Sigma G \Sigma^{-1} = -G,$$

$$\Sigma B \Sigma^{-1} = B, \quad \Sigma \lambda \Sigma^{-1} = -\psi, \quad \Sigma F \Sigma^{-1} = F,$$

$$\Sigma V_{\mu\nu} \Sigma^{-1} = V_{\mu\nu}, \quad \Sigma D \Sigma^{-1} = -D.$$

Ezek ismeretében meghatározhatók a $[Q_1, A], \dots$ transzformációs szabályok:

$$[Q_1, A] = i\lambda, \quad [Q_1, B] = i\gamma_5 \lambda,$$

$$[Q_1, V_{\mu\nu}] = -i(\partial_\mu \gamma_\nu - \partial_\nu \gamma_\mu) \psi,$$

$$\{Q_1, \bar{\lambda}\} = \hat{\partial}(-A + \gamma_5 B) + F - \gamma_5 G,$$

$$\{Q_1, \bar{\psi}\} = -\frac{1}{2} V_{\mu\nu} \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma_5 D,$$

$$[Q_1, F] = i\hat{\partial}\lambda,$$

$$[Q_1, G] = -i\gamma_5 \hat{\partial}\lambda,$$

$$[Q_1, D] = i\gamma_5 \hat{\partial}\psi.$$

Látható, hogy a második, Q_1 algebra már összekeveri a skalár és vektor multipllett komponenseit, együtt alkotnak egy ún. vektor hipermultiplettet. Hasonló lépésekkel megmutatható, hogy a skalár hipermultipllett, tehát amelynek komponensei $N=2$ kiterjesztett szuperszimmetria transzformáció során egymás között transzformálódnak, két valós skalár supermultipllettből áll. Láttuk korábban, hogy ez volt a szuperszimmetrikus kvantumelektrodinamika anyag multipllettje. Ez a tulajdonság a kiterjesztett szuperszimmetrikus elméletben is megmarad, míg a mértékmultipllett szerepét a vektor hipermultipllett kapja. A skalár hipermultiplletben egy Ψ Dirac-spinor és két φ', φ'' komplex skalár jelentik a fizikai tereket. Fentiek alapján az $N=2$ szuperszimmetrikus kvantumelektrodinamika Lagrange-függvénye komponens terekkel kifejezve a következő:

$$\begin{aligned} L = & -\frac{1}{4} V_{\mu\nu}^2 - i\bar{N}_L \hat{\partial} N_L - \frac{1}{2} (\partial_\mu A)^2 - \frac{1}{2} (\partial_\mu B)^2 - i\bar{\Phi} \hat{D} \Psi - (D_\mu \Phi)^2 + \\ & + ie\sqrt{2} [\Phi^{C+} \Psi (N_R^C - iN_L) + (\bar{N}_R^C - i\bar{N}_L) \Psi \Phi^C] - \\ & - i\Psi [m + e(A - \gamma_5 B)] \Psi - \frac{1}{2} e^2 (\Phi^+ \Phi)^2 - [(m + eA)^2 + e^2 B^2] \Phi^+ \Phi. \end{aligned}$$

Itt $iD_\mu = i\partial_\mu - eV_\mu$, a kovariáns derivált, és bevezettük az

$$N_L = \begin{pmatrix} \Psi_L \\ \lambda_L \end{pmatrix}, \quad N_R^C = \begin{pmatrix} \lambda_R \\ -\Psi_R \end{pmatrix}, \quad \Phi = \begin{pmatrix} -i\varphi' \\ \varphi'' \end{pmatrix}, \quad \Phi^C = \begin{pmatrix} \varphi''^+ \\ -i\varphi'^+ \end{pmatrix}$$

jelöléseket. Látható a Lagrange-függvény explicit invarianciája a belső szimmetriával szemben.

IRODALOM

1. *J. Wess*: Supersymmetry and supergravity (A Princeton Egyetemen tartott előadássorozat jegyzete, 1982.)
2. *P. Fayet, S. Ferrara*: Supersymmetry, Phys. Rep. 32, 249, 1977.
Fenti két összefoglaló további részletes irodalomjegyzéket tartalmaz.
3. *J. Wess, B. Zumino*, Nucl. Phys. B78, 1, 1974.
4. *J. Wess, B. Zumino*, Phys. Lett. 49B, 52, 1974.
5. *J. Iliopoulos, B. Zumino*, Nucl. Phys. B76, 310, 1974.
6. *S. Ferrara, B. Zumino*, Nucl. Phys. B87, 207, 1975.
7. *A. Salam, J. Strathdee*, Phys. Lett. 51B, 353, 1974.
8. *S. Ferrara, O. Piguet*, Nucl. Phys. B93, 261, 1975.
9. *P. Fayet*, Nucl. Phys. B113, 135, 1976.

SPONTÁN SÉRTETT SZUPERSZIMMETRIA

GÁLFI LÁSZLÓ

Eötvös Loránd Tudományegyetem Elméleti Fizikai Tanszék,
Budapest

1. A GOLDSTONE FERMION ÉS A SZUPERSZIMMETRIKUS VÁKUUM ÁLLAPOT

A szuperszimmetria spontán sérül, ha a vákuum állapot szuperszimmetria transzformációval szemben nem invariáns. Chirális és vektor szupermultipletekből felépíthető elméleteket fogunk vizsgálni. Írjuk fel a multiplettek spinor komponenseinek transzformációs szabályát, és tekintsük az egyenletek vákuum várható értékét:

$$\langle \{Q, \bar{\lambda}\} \rangle_0 = \langle \gamma_5 D \rangle_0,$$

$$\langle \{Q, \bar{\psi}\} \rangle_0 = F + \gamma_5 G \rangle_0.$$

Lorentz invariancia miatt csak a skalár komponensek vákuum értéke lehet zérustól különböző. A vákuum nem szuperszimmetria invariáns, ha $\langle \delta\lambda \rangle_0$ vagy $\langle \delta\psi \rangle_0$ nem zérus, tehát a D, F, G külső skalár terek valamelyikének vákuum értéke nem zérus.

A spontán szimmetriasértés zérus tömegű Goldstone fermion jelenlétére utal. Bizonyítható, hogy ha pl. $\langle F \rangle_0 \neq 0$, akkor van az elméletben egy a ψ -vel megegyező kvantumszámú, zérus tömegű részecske, a Goldstone fermion [2].

A Lagrange-függvényből a külső terek a mozgásegyenletek segítségével kiküszöbölhetők. A mozgásegyenletek megoldásai, $D(\varphi), F(\varphi), G(\varphi)$, a φ fizikai skalár terekben másodfokú polinomok. Ezeket behelyettesítve a Lagrange-függvénybe megjelenik egy $V(\varphi)$ potenciál, amelyre igaz, hogy

$$V(\varphi) \sim (D(\varphi)^2 + F(\varphi)^2 + G(\varphi)^2).$$

Jelöljük a vákuumállapotot, ha az szuperszimmetrikus, $|\Omega\rangle$ -val, ha nem szuperszimmetrikus, $|\Omega'\rangle$ -vel. $|\Omega\rangle$ akkor valósul meg, ha minden külső tér vákuum értéke zérus, $V(\varphi)=0$, nincs vákuumenergia. Ezért, ha létezik, $|\Omega\rangle$ mindig stabil (ellentétben a spontán sértett mértékelméletekkel, ahol a szimmetrikus vákuumállapot enregiája a magasabb, ezért instabil). $|\Omega'\rangle$ akkor valósul meg, ha legalább egy külső tér vákuum értéke nem zérus, $V(\varphi)>0$. Ez akkor lehetséges, ha a

$$D(\varphi) = 0, \quad F(\varphi) = 0, \quad G(\varphi) = 0$$

egyenletrendszernek nincs megoldása.

2. A BELSŐ SZIMMETRIA SPONTÁN SÉRTÉSE

2.1. Szuperszimmetrikus Goldstone mechanizmus

Tartalmazzon az elmélet n chirális Φ_a szuperteret. A legáltalánosabb szuperszimmetrikus, renormálható Lagrange-függvény:

$$L = \Phi_a^+ \Phi_a|_D + \left[\left(\frac{4}{3} g_{abc} \Phi_a \Phi_b \Phi_c + m_{ab} \Phi_a \Phi_b + \lambda_a \Phi_a \right)_F + \text{h.c.} \right].$$

Most a

$$\Phi = \frac{1}{2} (A - iB) + \theta\psi + \frac{1}{2} \theta\theta (F + iG)$$

sorfejtett alakot és az $A \rightarrow A - iB$, $F \rightarrow F + iG$ komplex térjelölést használjuk. A külső térre vonatkozó mozgásegyenlet:

$$\frac{\partial L}{\partial F_a} = F_a^* + g_{abc} A_b A_c + m_{ab} A_b + \lambda_a = 0.$$

A skalár terek potenciálja:

$$V(A) = \frac{1}{2} F_a^* F_a = \frac{1}{2} |g_{abc} A_b A_c + m_{ab} A_b + \lambda_a|^2.$$

Legyen $\langle A_a \rangle_0 = z_a$. A potenciál minimuma zérus, ha

$$g_{abc} z_b z_c + m_{ab} z_b + \lambda_a = 0.$$

Ez n másodfokú egyenletből álló egyenletrendszer az n számú z_a ismeretlenre. Ha van megoldása, akkor $\langle F_a \rangle_0 = 0$, és a szuperszimmetria megmarad, ha nincs, akkor spontán sérül. utóbbi esetet később vizsgáljuk. Hajtsunk végre translációt a Φ_a chirális szuperteren:

$$\Phi_a = \bar{\Phi}_a + \frac{1}{2} z_a, \quad A_a = \bar{A}_a + z_a.$$

A Lagrange-függvényt kifejezzük az eltolt terekkel:

$$L = \bar{\Phi}_a^+ \Phi_a|_D + \left[\left(\frac{4}{3} g_{abc} \bar{\Phi}_a \bar{\Phi}_b \bar{\Phi}_c + (2g_{abc} z_c + m_{ab}) \bar{\Phi}_a \bar{\Phi}_b \right)_F + \text{h.c.} \right].$$

Leolvasható, hogy $\bar{m}_{ab} = 2g_{abc} z_c + m_{ab}$ az eltolt szuperterek tömegmátrixa.

Tegyük fel, hogy a Lagrange-függvény invariáns valamilyen belső szimmetria transzformációval szemben. Ezt $\langle A_a \rangle_0 = z_a$ spontán sérti. A belső szimmetria csoport egy irreducibilis ábrázolásához tartozó multiplettek különböző tömegűek lesznek. Lesznek 0 tömegű multiplettek, ezek tartalmazzák a megfelelő Goldstone bozonokat.

Ha pl. a belső szimmetriacsoport $SU(2) \times U(1)$, és

$$\Phi = \begin{pmatrix} \Phi_0 \\ \Phi_- \end{pmatrix} \quad \text{az} \quad \begin{pmatrix} A_0 \\ A_- \end{pmatrix}$$

fizikai (komplex) skalár tereket tartalmazó dublett chirális szupertér, és $\langle A_0 \rangle_0 \neq 0$ valós, akkor az $SU(2) \times U(1)$ szimmetria spontán sérül, $U(1)$ -re redukálódik, és $Im A_0$, A_- a három Goldstone bozon.

Az elmondottak illusztrálására bemutatunk egy egyszerű modellt [3]:

$$L = [S^+ S + T^+ T + N^+ N]_D + [(2gT^+ SN + \lambda N)_F + \text{h. c.}].$$

S, T^+, N balkezes szuperterek, a belső szimmetriával szemben S és T^+ azonosan transzformálódik, N pedig szinglett. A megoldandó egyenletrendszer:

$$\langle 2gT^+ S + \lambda \rangle_0 = 0,$$

$$\langle 2gT^+ N \rangle_0 = 0,$$

$$\langle 2gNS \rangle_0 = 0.$$

$\langle \rangle_0$ az A komponensek vákuum értékét jelöli. Az egyenletrendszer megoldható, a szuperszimmetria megmarad. $\langle N \rangle_0 = 0$, de $\langle S \rangle_0 \neq 0$, $\langle T \rangle_0 \neq 0$, tehát a belső szimmetria spontán sérül.

2.2. Szuperszimmetrikus Higgs mechanizmus [4].

A következőkben a lokálismértékvariancia spontán sérülését vizsgáljuk. Emlékeztetőül felidézzük, hogy a tárgyalt supermultiplettek milyen fizikai tereket tartalmaznak.

chirális multipllett \rightarrow Majorana-spinor + 2 valós skalár

0-tömegű vektor multipllett \rightarrow Majorana-spinor + vektor

tömeges vektor multipllett \rightarrow Dirac-spinor + vektor + valós skalár.

A mértékmultiplettet a V vektor szupertér, az anyag multiplettet az S chirális szupertér tartalmazza, a mértéktranszformációt a A chirális szupertér segítségével végezzük. A mértéktranszformáció:

$$V \rightarrow V' = V + i(A - A^+), \quad S \rightarrow S' = \exp(-ieA)S.$$

A Lagrange-függvény

$$L = -\frac{1}{4} V_{\mu\nu}^2 - \frac{1}{2} i\bar{\lambda}\hat{\partial}\lambda + \frac{1}{2} D^2 + [S^+ \exp(eV)S + \xi V]_D$$

Wess—Zumino-mértékben polinom. A mozgásegyenletek:

$$F = 0,$$

$$D + \xi + eA^*A = 0.$$

A külső terek kiküszöbölése után:

$$L = -\frac{1}{4} V_{\mu\nu}^2 - \frac{1}{2} i\bar{\lambda}\hat{\partial}\lambda - i\bar{\psi}_L \hat{D}\psi_L - (D^\mu A)^2 + ie\sqrt{2}(\bar{\psi}_L \lambda A + A^* \bar{\lambda} \psi_L) - \frac{1}{2} |\xi + eA^*A|^2.$$

(A bal-, ill. jobbkezes projektorok $\frac{1}{2}(1-i\gamma_5)$, ill. $\frac{1}{2}(1+i\gamma_5)$). A spontán szimmetriasértést a

$$V(A) = \frac{1}{2} |\xi + eA^* A|^2$$

potenciál szabja meg. Ha $\xi e < 0$, akkor $\langle D \rangle_0 = 0$, $\langle A \rangle_0 \neq 0$ (mert $\langle A \rangle_0 = 0$ nem minimalizálja a potenciált), tehát a szuperszimmetria megmarad, a mértékinvariancia spontán sérül. Ha $\xi > 0$, akkor $\langle A \rangle_0 = 0$, $\langle D \rangle_0 \neq 0$, tehát a mértékinvariancia marad meg, és a szuperszimmetria sérül spontán. Ez utóbbi esetet később vizsgáljuk, legyen most $\xi e < 0$. Ekkor $\langle A \rangle_0 \neq 0$. A Wess—Zumino-mérték megválasztása után megmaradt közönséges mértéktranszformációt úgy választjuk meg, hogy

$$\langle \text{Im } A \rangle_0 = 0, \quad \langle B \rangle_0 \sim \langle \text{Re } A \rangle_0 = v$$

legyen, ahol v pozitív, és $\frac{1}{2} ev^2 + \xi = 0$. Legyen $\bar{B} = B - v$, $E = \psi_L + \lambda_R$, és olyan mértéket válasszunk, hogy $\text{Im } A = 0$ legyen. A Lagrange-függvényt ekkor a következő:

$$L = -\frac{1}{4} W_{\mu\nu}^2 - i\bar{E}\hat{\partial}E - \frac{1}{2}(\partial^\mu \bar{B})^2 - \frac{1}{2}(m + e\bar{B})^2 W^\mu W_\mu - \\ - \left(\frac{1}{2} m\bar{B} + \frac{1}{2} e\bar{B}^2 \right)^2 - i(m + e\bar{B})\bar{E}E + e\bar{E}_L \hat{W} E_L.$$

Az $U(1)$ mértéktranszformációt valamilyen Y skalár operátor generálja:

$$[Y, \text{Im } A] = \text{Re } A, \quad [Y, \text{Re } A] = \text{Im } A.$$

Mivel $\langle \text{Re } A \rangle_0 \neq 0$, így $\text{Im } A$ lenne a Goldstone bozon. Ehelyett az történt, hogy a V_μ vektor „megette” a Goldstone bozont, és tömeget kapott: $V_\mu + \partial_\mu \text{Im } A \rightarrow W_\mu$. A B téren transláció történt, és tömeget kapott: \bar{B} . ψ_L és λ_R összekapcsolódott az E tömeges Dirac-spinorrá. Minden részecske tömege $m = ev$. A folyamat szupertér nyelven a következő:

$$\begin{array}{c} V \text{ vektor szupertér} + S \text{ chirális szupertér} \\ \Downarrow \text{ szuperszimmetrikus Higgs mechanizmus } \Downarrow \\ W \text{ tömeges vektor szupertér} \end{array}$$

3. A SZUPERSZIMMETRIA SPONTÁN SÉRTÉSE

3.1. Az $U(1)$ módszer [5]

Vizsgáljuk az előző pontban leírt Lagrange-függvényt, és legyen most $\xi e > 0$. Ekkor $\langle D \rangle_0 = -\xi$, tehát a szuperszimmetria spontán sérül:

$$\langle Q, \bar{\lambda} \rangle_0 = -\xi \gamma_5.$$

λ a zérus tömegű Goldstone fermion. A chirális multipllett spinor komponense zérus tömegű marad, de skalár komponense $\sim \sqrt{\xi e}$ tömeget kap. Ez a módszer feltételezi,

hogy a Lagrange-függvény ξD tagot tartalmaz, azaz hogy a mértékcsoportnak van egy invariáns $U(1)$ tényezője. A következőkben az előbbieik alapján egy kicsit részletesebb modellt vizsgálunk.

$$L = L_0 + (S_1^+ \exp(eV) S_1 + S_2^+ \exp(-eV) S_2)_D + m(S_1 S_2 + S_1^+ S_2^+)_F + (\xi V)_D.$$

A potenciál:

$$V = \frac{1}{2} D^2 + F_1 F_1^* + F_2 F_2^*.$$

A mozgásegyenletek:

$$D + \frac{\xi}{2} + \frac{e}{2} (A_1^* A_1 - A_2^* A_2) = 0,$$

$$F_1 + m A_2^* = 0,$$

$$F_2 + m A_1^* = 0.$$

Az egyenletrendszernek nincs olyan megoldása, amelyre $V=0$, ezért a szuperszimmetria spontán sérül. A külső tereket kiküszöbölve:

$$V = \frac{1}{8} \xi^2 + \left(m^2 + \frac{1}{4} e\xi\right) A_1^* A_1 + \left(m^2 - \frac{1}{4} e\xi\right) A_2^* A_2 + \frac{1}{8} e^2 (A_1^* A_1 - A_2^* A_2)^2.$$

Ha $m^2 > \frac{1}{4} e\xi$, akkor $\langle A_1 \rangle_0 = \langle A_2 \rangle_0 = 0$ minimalizálja a potenciált, az $U(1)$ mérték-invariancia megmarad. Az elmélet részecsketartalma:

2 komplex skalár

$$\left. \begin{array}{l} A_1 \quad m_1^2 = m^2 + \frac{1}{4} e\xi \\ A_2 \quad m_2^2 = m^2 - \frac{1}{4} e\xi \end{array} \right\} m_1^2 + m_2^2 = 2m^2$$

3 spinor ψ_1, ψ_2 m tömegűek

λ 0 tömegű

1 vektor V_μ 0 tömegű

V_μ a sértetlen $U(1)$ szimmetria mértéktere, λ a spontán sértett szuperszimmetria Goldstone fermionja. Ha $m^2 < \frac{1}{4} e\xi$, akkor mind a mértékszimmetria, mind a szuperszimmetria spontán sérül.

3.2. Az O'Raifeartaigh módszer [6]

Az $U(1)$ módszer nem alkalmazható, ha a mértékcsoporthoz nincs $U(1)$ tényezője, vagy ha tisztán chirális szuperterekből álló elméletről van szó. Utóbbira példa a már korábban vizsgált modell kissé kibővített alakja:

$$L = [S^+ S + T^+ T + \underline{N}^+ \underline{N} + N'^+ N']_D + [2T^+ (g\tau \underline{N} + g' N') S + \lambda N']_F,$$

ahol S, T^+ balkezes dublettek, \underline{N} balkezes tripllett, N' balkezes szinglett. A modell $SU(2) \times U(1)$ invarianciát mutat. A külső terek vákuum értékei akkor lehetnek zérusok, ha a

$$\langle 2gT^+ \underline{S} \rangle_0 = 0,$$

$$\langle 2g' T^+ S + \lambda \rangle_0 = 0,$$

$$\langle 2T^+ (g\tau \underline{N} + g' N') \rangle_0 = 0,$$

$$\langle 2(g\tau \underline{N} + g' N') S \rangle_0 = 0$$

egyenletrendszernek van megoldása ($\langle \rangle_0$ az A komponensek vákuum értékét jelöli). Az első két egyenlet egymásnak ellentmondó, ezért a szuperszimmetria spontán sérül.

Láttuk, hogy általánosan a

$$g_{abc} z_b z_c + m_{ab} z_b + \lambda_a = 0$$

egyenletrendszer megoldhatóságát kell vizsgálni. O'Raifeartaigh bebizonyította, hogy minimálisan 3 chirális szupertér kell ahhoz, hogy spontán szuperszimmetria sértés megvalósulhasson. A legegyszerűbb példa a következő:

$$\lambda_0 = \lambda, \quad m_{12} = m_{21} = m, \quad g_{011} = g_{101} = g_{110} = g,$$

a többi zérus. A

$$gz_1^2 + \lambda = 0,$$

$$2gz_0 z_1 + mz_2 = 0,$$

$$mz_1 = 0$$

egyenletrendszernek nincs megoldása.

IRODALOM

1. P. Fayet, S. Ferrara: Supersymmetry, Phys. Rep. 32, 249, 1977.
Ez az összefoglaló további részletes irodalomjegyzéket tartalmaz.
2. A. Salam, J. Strathdee, Phys. Lett. 49B, 465, 1974.
J. Iliopoulos, B. Zumino, Nucl. Phys. B76, 310, 1974.
3. P. Fayet, Nucl. Phys. B90, 104, 1975.
4. P. Fayet, Nuovo Cim. 31A, 626, 1976.
5. P. Fayet, J. Iliopoulos, Phys. Lett. 51B, 461, 1974.
6. L. O'Raifeartaigh, Nucl. Phys. B96, 331, 1975.
P. Fayet, Phys. Lett. 58B, 67, 1975.

RENORMÁLÁS ÉS ULTRAIBOLYA VÉGESSÉG. A NICOLAI LEKÉPEZÉS ÉS SZTOCHASZTIKUS INTERPRETÁCIÓJA

SZLACHÁNYI KORNÉL

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

I. A WESS—ZUMINO-MODELL RENORMÁLÁSA

A szuperszimmetria megszületésével egyidős — sőt talán a szuperszimmetria felfedezésének egyik motivációja volt — az az észrevétel, hogy bizonyos térelméletekben a csatolási állandók és tömegek egy speciális értéke esetén (éppen a szuperszimmetrikus esetben) a divergens gráfok nagy része kiesik, és ezért bizonyos tömegek és csatolások nem renormálódnak. Így a szuperszimmetrikus elméletek általában „végeesebbek”, mint amit egy hatványszámolás jósolna. A szuperszimmetrikus elektrodinamikában például sem a csatolási állandó, sem a tömeg nem renormálódik, csak egy hullámfüggvény renormálásra van szükség. Nem-Ábeli esetben kicsit rosszabb a helyzet: itt csak a tömeg nem renormálódik a rendes nem-Ábeli mértékelméletekkel összehasonlítva [2]. Ez a jelenség azt az érdekes kérdést veti fel, hogy létezik-e olyan (4 dimenziós) térelmélet, amely „magától” véges, azaz amelyben renormálásra nincs is szükség. A perturbatív szintű válasz erre a kérdésre igenlő. A kiterjesztett szuperszimmetriájú $N=4$ modell a perturbációs számítás minden rendjében véges [3].

A továbbiakban a nem renormálódás jelenségét illusztrálандó a legegyszerűbb szuperszimmetrikus térelmélet, a Wess—Zumino-modell példáján mutatjuk meg, hogy hogyan működik az a mechanizmus, melynek során a 19 primitív divergens Green-függvényt egyetlen hullámfüggvény renormálás végessé teszi. A ma már elterjedtebb szupertér formalizmus helyett — követve az eredeti *Iliopoulos—Zumino* cikket [1] — szokásos skalár, fermion ... stb. térmennyiségeket fogunk használni azért, hogy a szupergráf technikában kevésbé járatos olvasó számára is áttekinthető legyen mondandónk.

A $W-Z$ -modell valós értékű terei: A és F skalár, B és G pszeudoskalár, Ψ Majorana-spinor. A Lagrange-függvény

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_m + \mathcal{L}_g, \quad (1)$$

ahol

$$\mathcal{L}_0 = \frac{1}{2} \partial^\mu A \partial_\mu A + \frac{1}{2} \partial^\mu B \partial_\mu B + \frac{i}{2} \bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\mu \psi + \frac{1}{2} F^2 + \frac{1}{2} G^2 \quad (2)$$

$$\mathcal{L}_m = m \left(FA + GB - \frac{1}{2} \bar{\psi} \psi \right) \quad (3)$$

$$\mathcal{L}_g = g (FA^2 - FB^2 + 2GAB - \bar{\psi} \psi A + \bar{\psi} \gamma_5 \psi B).$$

A γ mátrixok a tiszta képzetes Majorana-reprezentációban:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \sigma_2 \\ \sigma_2 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} i\sigma_3 \\ i\sigma_3 \end{pmatrix}, \quad \gamma^2 = \begin{pmatrix} i \\ -i \end{pmatrix}, \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} -i\sigma_1 \\ -i\sigma_1 \end{pmatrix}.$$

A perturbatív regularizáláshoz szükségünk lesz egy regularizáló tagra is a Lagrange-függvényben:

$$\mathcal{L}_\xi = \xi \left[\frac{1}{2} (\partial^\mu \square A) (\partial_\mu \square A) + \frac{1}{2} (\partial^\mu \square B) (\partial_\mu \square B) + \frac{i}{2} \square \bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\mu \square \psi + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} (\square F)^2 + \frac{1}{2} (\square G)^2 \right].$$

A teljes „regularizált Lagrange-függvény” $\mathcal{L} + \mathcal{L}_\xi$ invariáns a konstans α Grassmann-paraméterű szuperszimmetria transzformációra:

$$\begin{aligned} \partial A &= \bar{\alpha} \psi \\ \partial B &= \bar{\alpha} \gamma_5 \psi \\ \partial \psi &= i \partial_\mu (A - \gamma_5 B) \gamma^\mu \alpha + (F + \gamma_5 G) \alpha \\ \delta F &= i \bar{\alpha} \gamma^\mu \partial_\mu \psi \\ \delta G &= i \bar{\alpha} \gamma_5 \gamma^\mu \partial_\mu \psi. \end{aligned} \quad (4)$$

A kvadratikus Lagrange-függvényből, $\mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_m$ -ből a következő (nem regularizált) propagátorok adódnak:

$$\begin{aligned} \Delta_{AA}(k) &= \frac{i}{k^2 - m^2} = \Delta_{BB}(k) \\ \Delta_{FA}(k) &= -\frac{im}{k^2 - m^2} = \Delta_{GB}(k) \\ \Delta_{FF}(k) &= \frac{ik^2}{k^2 - m^2} = \Delta_{GG}(k) \\ \Delta\psi\psi(k) &= i(\gamma^\mu k_\mu - m)^{-1}. \end{aligned} \quad (5)$$

Tekintsünk egy a perturbációszámításban fellépő $1 - PI$ Feynman-gráfot. Ha a belső XY vonalak számát I_{XY} -nal, a külső X -lábak számát E_X -szel az XYZ típusú vertexek számát V_{XYZ} -vel jelöljük ($X, Y, Z = A, B, \psi, F, G$), akkor a következő egyenleteket írhatjuk fel:

$$2V_{FA^2} + V_{GAB} + V_{\psi\psi A} = 2I_{AA} + I_{AF} + E_A \quad (6)$$

$$2V_{FB^2} + V_{GAB} + V_{\psi\psi B} = 2I_{BB} + I_{BG} + E_B \quad (7)$$

$$2V_{\psi\psi A} + 2V_{\psi\psi B} = 2I_{\psi\psi} + E_\psi \quad (8)$$

$$V_{FA^2} + V_{FB^2} = 2I_{FF} + I_{AF} + E_F \quad (9)$$

$$V_{GAB} = 2I_{GG} + I_{BG} + E_G. \quad (10)$$

A gráf primitív divergencia foka kiszámítható a propagátorok (5) alakjának és a (3)-beli vertexfüggvények impulzus függetlenségének figyelembevételével.

$$D = -2I_{AA} - 2I_{AF} - 2I_{BB} - 2I_{BG} - I_{\psi\psi} + 4L,$$

ahol L a gráf független zárt hurkainak a száma:

$$L = I_{AA} + I_{AF} + I_{FF} + I_{BB} + I_{BG} + I_{GG} + I_{\psi\psi} - (V_{FA^2} + V_{FB^2} + V_{GAB} + V_{\psi\psi A} + V_{\psi\psi B}) + 1.$$

Ha az összes vertexek számát L -ből kiküszöböljük oly módon, hogy (6)-ot és (7)-et 1-gyel, (8)-at $3/2$ -del, (9)-et és (10)-et 2-vel megszorozzuk, majd összeadjuk őket, akkor a primitív divergencia fokra a következőt kapjuk:

$$D = 4 - I_{AF} - I_{BG} - E_A - E_B - \frac{3}{2} E_\psi - 2E_F - 2E_G. \quad (11)$$

Ebből látható, hogy \mathcal{L}_ξ valóban regularizálja a perturbációs számítás gráfjait. Ha a gráfokban az \mathcal{L}_ξ figyelembevételével adódó regularizált propagátorokat írjuk, amelyek minden propagátor UV viselkedését legalább $1/k^4$ -nel megjavítják, akkor minden gráfra $D < 0$. (11)-ből a primitív divergens Green-függvények a következők (a paritásra antiszimmetrikusokat eleve kihagytuk):

(12)

A divergencia fokokat figyelembe véve a renormálás tehát 22 levonást igényel. Ezek azonban nem mind függetlenek, ha előírjuk, hogy elméletünk a renormálás után is szuperszimmetrikus legyen. Ehhez tudnunk kell, hogy a szuperszimmetria milyen Ward-azonosságokat implicál a regularizált (nem renormált) Green-függvényekre. Vezessük be a $J_x \Phi_x \equiv \int d^4x (J_A A + J_B B + J_\psi \Psi + J_F F + J_G G)$ forrástagot a Lagrange-függvénybe és definiáljuk a

$$Z_\xi(J) = \int \mathcal{D}\Phi e^{i \int d^4x (\mathcal{L} + \mathcal{L}_\xi) + i J_x \Phi_x}$$

regularizált generátorfunkcionált úgy, mint az exponens g szerinti hatványsorának tagonkénti (Gauss) integrálásából előálló hatványsort. Ilyen definíció mellett a

$D\Phi$ mérték SUSY-invariáns és ha a források transzformációs szabályát

$$\begin{aligned}\delta J_A &= i\partial_\mu \bar{J}_\psi \gamma^\mu \alpha \\ \delta J_B &= -i\partial_\mu \bar{J}_\psi \gamma_5 \gamma^\mu \alpha \\ \delta J_\psi &= -i\partial_\mu (J_F - \gamma_5 J_G) \gamma^\mu \alpha - (J_A + \gamma_5 J_B) \alpha \\ \delta J_F &= -\bar{J}_\psi \alpha \\ \delta J_G &= -\bar{J}_\psi \gamma_5 \alpha\end{aligned}\quad (13)$$

módon definiáljuk, akkor $J_x \Phi_x$ is az. Következésképpen $W_\xi(J) = -i \log Z_\xi(J)$, az összefüggő Green-függvényeket generáló funkcionál kielégíti a

$$\delta J_x \frac{\delta W_\xi(J)}{\delta J_x} = 0 \quad (14)$$

Ward-azonosságot. Az 1-PI Green-függvényeket generáló funkcionál:

$$\Gamma_\xi(\Phi) = W_\xi(J(\Phi)) - J_x(\Phi) \Phi_x,$$

ahol a $J_x(\Phi)$ függvények a $\frac{\delta W_\xi}{\delta J_x} = \Phi_x$ egyenletek megoldásai J_x -re. A $\Gamma_\xi(\Phi)$ -re vonatkozó Ward-azonosság könnyen adódik (14)-ből és (13)-ból.

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial}{\partial \bar{\alpha}} \delta \Phi_x\right) \frac{\delta \Gamma_\xi}{\delta \Phi_x} &= \int d^4 x \left\{ \psi(x) \frac{\delta \Gamma_\xi}{\delta A(x)} + \gamma_5 \psi(x) \frac{\delta \Gamma_\xi}{\delta B(x)} + i\gamma^\mu \partial_\mu \psi(x) \frac{\delta \Gamma_\xi}{\delta F(x)} + \right. \\ &\quad \left. + i\gamma_5 \gamma^\mu \partial_\mu \psi(x) \frac{\delta \Gamma_\xi}{\delta G(x)} + [-i\partial_\mu (A + \gamma_5 B) \gamma^\mu + F + \gamma_5 G] \frac{\delta \Gamma_\xi}{\delta \psi(x)} \right\} = 0\end{aligned}\quad (15)$$

(15)-öt Ψ -szerint deriválva, majd $\Phi_x=0$ -t írva minden x -re kapjuk, hogy a (12)-beli regularizált 1-pont függvények azonosan nullák.

$$\Gamma_\xi^A(x) = \Gamma_\xi^F(x) = 0. \quad (16)$$

A 2-pont függvényekre vonatkozó Ward-azonosságok (15)-nek rendre a $\Psi, A; \Psi, B; \Psi, F$ és Ψ, G szerinti deriváltjaiból nyerhetők a $\Phi=0$ helyen:

$$\Gamma_\xi^{AA}(x, y) - i\gamma^\mu \partial_\mu^x \Gamma_\xi^{FA}(x, y) - i\gamma^\mu \partial_\mu^x \Gamma_\xi^{\Psi\Psi}(x, y) = 0 \quad (17)$$

$$\Gamma_\xi^{BB}(x, y) - i\gamma^\mu \partial_\mu^x \Gamma_\xi^{GB}(x, y) - i\gamma^\mu \partial_\mu^x \Gamma_\xi^{\Psi\Psi}(x, y) = 0 \quad (18)$$

$$\Gamma_\xi^{FA}(x, y) - i\gamma^\mu \partial_\mu^x \Gamma_\xi^{FF}(x, y) + \Gamma_\xi^{\Psi\Psi}(x, y) = 0 \quad (19)$$

$$\Gamma_\xi^{GB}(x, y) - i\gamma^\mu \partial_\mu^x \Gamma_\xi^{GG}(x, y) + \Gamma_\xi^{\Psi\Psi}(x, y) = 0. \quad (20)$$

Vezessük be a $G^{(1)}$ és $G^{(2)}$ függvényeket, amelyekkel a fermion propagátor inverze

$$\Gamma_\xi^{\bar{\Psi}\Psi}(x, y) = i\gamma^\mu \partial_\mu^x G^{(1)}(x-y) + G^{(2)}(x-y) \quad (21)$$

alakba írható. Akkor a (17)–(20) egyenletek Dirac-térbeli spurja a következő egyenleteket adja:

$$\Gamma_{\xi}^{AA}(x, y) = -\square G^{(1)}(x - y) \quad (22)$$

$$\Gamma_{\xi}^{BB}(x, y) = -\square G^{(1)}(x - y) \quad (23)$$

$$\Gamma_{\xi}^{FA}(x, y) = -G^{(2)}(x - y) \quad (24)$$

$$\Gamma_{\xi}^{GB}(x, y) = -G^{(2)}(x - y) \quad (25)$$

(19)-re és (20)-ra az $i\gamma^{\mu}\partial_{\mu}$ operátorral hatva kapjuk, hogy

$$\square \Gamma_{\xi}^{FF}(x, y) = \square G^{(1)}(x - y) \quad (26)$$

$$\square \Gamma_{\xi}^{GG}(x, y) = \square G^{(1)}(x - y). \quad (27)$$

A renormált fermion 2-pont függvényt a

$$\Gamma_{\text{ren}}^{\bar{\psi}\psi}(\hat{p}) = \lim_{\xi \rightarrow 0} Z_{\xi} \Gamma_{\xi}^{\bar{\psi}\psi}(\hat{p}) \Big|_{m=m_{\xi}} \quad (28)$$

egyenlet definiálja, ahol a csupasz tömeg m_{ξ} , a csupasz töltés g_{ξ} és a fermion hullám-függvény renormálási állandó Z_{ξ} azáltal rögzítődik, hogy $\Gamma_{\text{ren}}^{\bar{\psi}\psi}(\hat{p})$ -ra előírjuk, hogy

$$\Gamma_{\text{ren}}^{\bar{\psi}\psi}(\hat{p} = 0) = -m_{\text{ren}} \quad (29)$$

$$\frac{d}{d\hat{p}} \Gamma_{\text{ren}}^{\bar{\psi}\psi}(\hat{p} = 0) = 1 \quad (30)$$

vagyis, hogy $p \approx 0$ -ra a fagráf értékével egyezzen meg. A (22)–(27) egyenletek mutatják, hogy ekkor a

$$\Gamma_{\text{ren}}^{XY} = \lim_{\xi \rightarrow 0} Z_{\xi} \Gamma_{\xi}^{XY} \Big|_{m=m_{\xi}} \quad (X, Y = A(x), B(x), \dots) \quad (31)$$

2-pont függvények végesek, vagyis hogy minden térnek ugyanaz — ti. Z_{ξ} — a hullám-függvény renormálási állandója. (19) és (30) természetesen még nem elegendő Z_{ξ} , m_{ξ} és g_{ξ} egyértelmű meghatározásához. Szükségünk van egy 3-pont függvényre, amellyel a renormált csatolást rögzítenénk. A (15) Ward-identitásból

$$\Gamma_{\xi}^{FAA}(p_i = 0) = -\Gamma_{\xi}^{FBB}(p_i = 0) = \Gamma_{\xi}^{GAB}(p_i = 0) = -\Gamma_{\xi}^{\bar{\psi}\psi A}(p_i = 0) = \gamma_5 \Gamma_{\xi}^{\bar{\psi}\psi B}(p_i = 0). \quad (32)$$

Ezért a megfelelő renormált mennyiségek mindegyikét egyszerre rögzíthetjük:

$$\Gamma_{\text{ren}}^{FAA}(p_i = 0) = -\Gamma_{\text{ren}}^{FBB}(p_i = 0) = \dots = -\Gamma_{\text{ren}}^{\bar{\psi}\psi A}(p_i = 0) = 2g_{\text{ren}}. \quad (33)$$

A (12)-ben még szereplő Γ_{ξ}^{AAA} és Γ_{ξ}^{BBB} függvényekről kiderül, ha (15) megfelelő deriváltjait képezzük, hogy valójában nem primitív divergensek: $\Gamma_{\xi}^{AAA}(p_i = 0) = \Gamma_{\xi}^{BBB}(p_i = 0) = 0$. A 4-pont függvényekről hasonlóan látható be, hogy nem primitív divergensek: $\Gamma_{\xi}^{AAAA}(p_i = 0) = \Gamma_{\xi}^{AABB}(p_i = 0) = \Gamma_{\xi}^{BBBB}(p_i = 0) = 0$. Tehát a (29), (30) és (33)

renormálási feltételek véges renormált

$$\Gamma_{\text{ren}}^{X_1 \dots X_n} = \lim_{\xi \rightarrow 0} Z_\xi^{n/2} \Gamma_\xi^{X_1 \dots X_n} \Big|_{\substack{m=m_\xi \\ g=g_\xi}}$$

Green-függvényeket definiálnak, amelyek kielégítik a (15)-(ből származó) Ward-azonosságokat. Ezzel beláttuk, hogy a modell renormálása a szuperszimmetria megőrzésével végrehajtható.

Eddig azonban nincs okunk a meglepődésre. Egy szimmetria előírása mindig csökkenti a szükséges levonások számát. Így történhetett, hogy a (12)-beli összes divergencia három paraméterbe, (Z_ξ, m_ξ, g_ξ) -be volt sűrítendő. Ez a három szabadságfok onnan származik, hogy Lagrange-függvényünk három külön-külön is SUSY invariáns tagból áll (ld. (1), (2), (3)). Most következik egy látszólag véletlen, tudniillik hogy ez a három paraméter sem független, hanem teljesülnek az

$$m_\xi = Z_\xi^{-1} m_{\text{ren}} \quad (34)$$

$$g_\xi = Z_\xi^{-3/2} g_{\text{ren}} \quad (35)$$

relációk a perturbációs számítás minden rendjében ($\xi \rightarrow 0$ esetén 0-hoz tartó tagok erejéig). Mint látni fogjuk, ezek a relációk nem vezethetők le kizárólag a (15) Ward-azonosságból, hanem fel kell használni a Lagrange-függvénynek azt a tulajdonságát is, hogy

$$\frac{\partial}{\partial m} \mathcal{L}_m = \frac{1}{2g} \frac{\partial}{\partial A} \mathcal{L}_g. \quad (36)$$

Ennek ellenére nincs értelme azt megkérdezni, hogy a (34), (35) által kifejezett „véletlen” kiejtések vajon a SUSY következményei-e vagy sem. Tudniillik modellünk (a szabad elmélettől eltekintve) az egyetlen olyan renormálható szuperszimmetrikus térelmélet, amely csak egy $\Phi = (A, B, \Psi, F, G)$ skalár multiplettet tartalmaz.

Felhasználva most már a (36) összefüggést a $Z_\xi(J)$ generátorfukcionálnak a csupasz tömeg szerinti deriváltja

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial m} Z_\xi(J) &= \frac{\partial}{\partial m} \int \mathcal{D}\Phi e^{i \int d^4x (\mathcal{L} + \mathcal{L}_\xi) + iJ\Phi} = \frac{i}{2g} \int \mathcal{D}\Phi e^{i \int d^4x (\mathcal{L} + \mathcal{L}_\xi) + iJ\Phi} \int d^4y \frac{\partial \mathcal{L}_g}{\partial A}(y) = \\ &= -\frac{1}{2g} \int \mathcal{D}\Phi e^{i \int d^4x \mathcal{L}_g} \int d^4y \frac{\delta}{\delta A(y)} e^{i \int d^4x (\mathcal{L} + \mathcal{L}_\xi - \mathcal{L}_g) + iJ\Phi} = \\ &= -\frac{i}{2g} \int \mathcal{D}\Phi e^{i \int d^4x (\mathcal{L} + \mathcal{L}_\xi) + iJ\Phi} \left\{ m \int d^4y F(y) + \int d^4y J_A(y) \right\} = \\ &= -\frac{m}{2g} \int d^4y \frac{\delta Z_\xi(J)}{\delta J_F(y)} - \frac{i}{2g} Z_\xi(J) \int d^4y J_A(y). \end{aligned}$$

Ebből egyszerűen nyerhető a nem renormált $1-PI$ Green-függvények generátorfukcionáljára vonatkozó

$$\frac{\partial}{\partial m} \Gamma_\xi(\Phi) = -\frac{m}{2g} \int F(y) d^4y + \frac{1}{2g} \int \frac{\delta \Gamma_\xi(\Phi)}{\delta A(y)} d^4y \quad (37)$$

egyenlet. A (37)-ben szereplő m és g természetesen m_ξ -vel, illetve g_ξ -vel helyettesítendő a $\xi \rightarrow 0$ limesz során. Deriváljuk (37)-et F szerint, majd vegyük a $\Phi=0$ helyen:

$$0 = -\frac{m_\xi}{2g_\xi} + \frac{1}{2g_\xi} \Gamma_\xi^{FA}(p^2=0).$$

A (29) renormálási feltétel, valamint (21), (24) és (28) alapján azonnal adódik a kívánt (34) összefüggés. Hasonlóan véve (37)-nek a Ψ szerinti második funkcionál deriváltját:

$$\frac{\partial}{\partial m_\xi} \Gamma_\xi^{\bar{\Psi}\Psi}(\hat{p}=0) = \frac{1}{2g_\xi} \Gamma_\xi^{\bar{\Psi}\Psi A}(P_i=0)$$

(34) és (29) szerint $\Gamma_\xi^{\bar{\Psi}\Psi}(\hat{p}=0) = -m_\xi + o(\xi)$, ezért a (33) renormálási feltétel $\Gamma_{\text{ren}}^{\bar{\Psi}\Psi A}$ -ra szolgáltatja (35)-öt. Ezzel bebizonyítottuk, hogy a Wess—Zumino-modell renormálásához csak egy közös hullámfüggvény renormálási állandó kell, a tömeg és a csatolási állandó kontragja minden rendben eltűnik.

II. A NICOLAI LEKÉPEZÉS ÉS SZTOCHASZTIKUS INTERPRETÁCIÓJA

Az utóbbi években egy érdekes kapcsolatra derült fény a kvantumtérelmélet és bizonyos sztochasztikus folyamatok között. Ez az ún. Parisi—Wu mechanizmus vagy más néven sztochasztikus kvantálás [4, 5]. Az egyszerűség kedvéért vegyünk egy euklideszi skalár térelméletet D téridő dimenzióban, amelynek hatása $S(\varphi)$. A korrelációs függvényeket a

$$\langle \varphi(x_1) \dots \varphi(x_n) \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\varphi e^{-S(\varphi)} \varphi(x_1) \dots \varphi(x_n) \quad (38)$$

képlet definiálja.

Tekintsünk most egy másik problémát! Legyen $\Phi_t(x)$ (ahol $x \in \mathbb{R}^D$) egy véletlen függvény, amelynek a t fiktív időbeli fejlődését a

$$\frac{\partial}{\partial t} \Phi_t(x) = -\frac{1}{2} \frac{\delta S(\Phi_t)}{\delta \varphi(x)} + \eta(x, t) \quad (39)$$

Langevin-egyenlet határozza meg. Az η véletlen függvény egy fehér zaj, azaz egy Gauss-i véletlen függvény zérus átlaggal és Dirac-delta kovarianciával.

$$\overline{\eta(x, t)} = 0, \quad \overline{\eta(x_1, t_1) \eta(x_2, t_2)} = \delta(x_1 - x_2) \delta(t_1 - t_2).$$

Ha $\Phi_t(x)$ megoldása a (39) sztochasztikus differenciál egyenletnek, akkor igaz a következő kapcsolat a $t = \infty$ -beli (egyensúlyi) sztochasztikus átlagok és a (38)-beli térelméleti átlagok között:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \overline{\Phi_t(x_1) \Phi_t(x_2) \dots \Phi_t(x_n)} = \langle \varphi(x_1) \dots \varphi(x_n) \rangle. \quad (40)$$

Bizonyos szuperszimmetrikus elméletekhez találtak olyan sztochasztikus folyamatokat, amelyek nem egy fiktív időben, hanem a valódi időben fejlődnek és amelyekre a (40)-hez hasonló összefüggés igaz. Ez a sztochasztikus folyamat nem más,

mint a Nicolai-leképezés. De mielőtt ezt megmutatnánk, próbáljuk a (40) egyenletet jobban megérteni, hiszen ez önmagában is érdekes összefüggés.

Legyen $p_t(\varphi', \varphi)$ a Φ_t folyamat átmeneti valószínűsége, azaz annak a valószínűség sűrűsége, hogy $\Phi_t = \varphi'$ feltéve, hogy $\Phi_0 = \varphi$. Minthogy (39) egy diffúziós folyamat egyenlete, p_t -nek teljesíteni kell Kolmogorov első egyenletét (backward equation):

$$\partial_t P_t(\varphi', \varphi) = -\frac{1}{2} \int d^D x \frac{\delta S}{\delta \varphi(x)} \frac{\delta}{\delta \varphi(x)} P_t(\varphi', \varphi) + \frac{1}{2} \int d^D x \frac{\delta^2}{\delta \varphi(x)^2} P_t(\varphi', \varphi) \quad (41)$$

(ld. pl. 6). Tehát $p_t(\varphi', \varphi) = e^{-tH} p_0(\varphi', \varphi) = e^{-tH} \delta(\varphi', \varphi)$,

$$\text{ahol} \quad \mathcal{H} = \frac{1}{2} \int d^D x \frac{\delta S}{\delta \varphi(x)} \frac{\delta}{\delta \varphi(x)} - \frac{1}{2} \int d^D x \frac{\delta^2}{\delta \varphi(x)^2}.$$

Az egyensúlyi eloszlás $\varrho(\varphi)$, azaz amelyre

$$\int \mathcal{D}\varphi P_t(\varphi', \varphi) \varrho(\varphi) = \varrho(\varphi')$$

kielégíti a $H^+ \varrho = 0$ egyenletet, ahol H^+ a H adjungáltja az $(f, g) = \int D\varphi f(\varphi)^* g(\varphi)$ skalárszorzat szerint, s amelynek megoldása

$$\varrho(\varphi) = \frac{1}{Z} e^{-S(\varphi)}.$$

A Z konstans úgy választjuk, hogy $\int \varrho(\varphi) D\varphi = 1$ legyen.

Ha $f(\varphi)$ egy komplex értékű funkcionál, akkor t időbeli átlaga, amelyet a (39) egyenlet $\Phi_0 = \varphi_0$ kezdőfeltétellel definiál:

$$E_t(f|\varphi_0) = \overline{f(\Phi_t[M])} = \int \mathcal{D}\varphi P_t(\varphi_1, \varphi_0) f(\varphi) = [e^{-t\mathcal{H}} f](\varphi_0). \quad (42)$$

Itt $\Phi_t[\eta]$ a (39) megoldása rögzített η mellett $\Phi_0 = \varphi_0$ kezdőfeltétellel és a felülvonás az η szerinti átlagolást jelöli. Létezik egy olyan skalárszorzat is, amelyben H önadjungált. Ez a következő:

$$\langle f|g \rangle = \int \mathcal{D}\varphi \varrho(\varphi) f(\varphi)^* g(\varphi). \quad (43)$$

Ennek segítségével H olyan alakba írható, amely nagyon emlékeztet egy szuperszimmetrikus Hamilton-operátorra,

$$\mathcal{H} = \int d^D x Q(x)^* Q(x).$$

$$Q(x) = -i \frac{\delta}{\delta \varphi(x)}$$

és * a (43) skalárszorzat szerinti adjungálás. Innen látszik, hogy H minimális sajátértéke 0 és a megfelelő sajátaltér egydimenziós, amelyet az azonosan 1 funkcionál

veszt ki. Tehát

$$\lim_{t \rightarrow \infty} e^{-t\mathcal{H}} = |1\rangle\langle 1|$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} E_t(f|\varphi_0) = (|1\rangle\langle 1|f\rangle)(\varphi_0) = \langle 1|f\rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\varphi e^{-S(\varphi)} f(\varphi)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \overline{f(\Phi_t[\eta])} = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\varphi e^{-S(\varphi)} f(\varphi),$$

ami $f(\varphi) = \varphi(x_1) \dots \varphi(x_n)$ esetén átmegy (40)-be, amit igazolni akartunk.

Következő feladatunk megmutatni, hogy a Nicolai-leképezés egy az igazi időben zajló sztochasztikus folyamatként interpretálható [8]. Ezzel azt is igazoljuk, hogy egy olyan $(D-1)+1$ dimenziós (szuperszimmetrikus) kvantumtérelmélet, amelyben van Nicolai-leképezés ekvivalens egy a $D-1$ dimenziós klasszikus függvények terén definiált sztochasztikus folyamattal.

Először is definiálnunk kell, hogy mit nevezünk Nicolai-leképezésnek [7]. Legyen $S = S_B(\varphi) + \psi i M(\varphi) \psi$ egy szuperszimmetrikus hatás, ahol φ jelöli az összes bozonikus, ψ a fermion tereket. A $\varphi \rightarrow \eta = N(\varphi)$ leképezés, ahol η szintén bozonikus Nicolai-leképezés, ha

$$S_B(\varphi) = \frac{1}{2} \int d^D x [N(\varphi)(x)]^2 \quad (44)$$

$$\det \frac{\delta N(\varphi)}{\delta \varphi} = \det M(\varphi). \quad (45)$$

Ekkor igaz a következő összefüggés:

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}\eta e^{-\frac{1}{2} \int d^D x \eta^2(x)} e^{i \int d^D x J(x) [N(\eta)^{-1}(x)]} &= \int \mathcal{D}\eta \int \mathcal{D}\varphi \delta(\varphi - N^{-1}(\eta)) e^{-S_B(\varphi) + i \int d^D x J(x) \varphi(x)} = \\ &= \int \mathcal{D}\eta \int \mathcal{D}\varphi \delta(N(\varphi) - \eta) \det M(\varphi) e^{-S_B(\varphi) + i \int d^D x J(x) \varphi(x)} = \\ &= \int \mathcal{D}\varphi \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S(\varphi, \bar{\psi}, \psi) + i \int d^D x J(x) \varphi(x)}. \end{aligned}$$

Tehát a szuperszimmetrikus elmélet bozonikus (és ezért a SUSY miatt az összes euklideszi Green-függvényei kiszámíthatók a $\varphi_\eta(x_1) \dots \varphi_\eta(x_n)$ mennyiségnek az η fehér zaj szerinti átlagolásából

$$\langle \varphi(x_1) \dots \varphi(x_n) \rangle = \overline{\varphi_\eta(x_1) \dots \varphi_\eta(x_n)}, \quad (46)$$

ahol $\varphi_\eta = N^{-1}(\eta)$ az $\eta = N(\varphi)$ sztochasztikus egyenlet megoldása.

1. Példa; Szuperszimmetrikus kvantummechanika.
Az euklideszi hatás

$$S = \int dt \left[\frac{1}{2} \dot{\phi}(t)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{dV(\phi(t))}{d\phi} \right)^2 + \bar{\psi}(t) \left(i \frac{d}{dt} + i \frac{d^2 V(\phi(t))}{d\phi^2} \right) \psi(t) \right].$$

A Nicolai-leképezés ebben az esetben

$$\eta(t) = \dot{\phi}(t) + \frac{dV(\phi(t))}{d\phi},$$

ami pontosan egy Langevin-egyenlet a $\phi(t)$ véletlen folyamatra.

$$\frac{1}{2} \eta^2 = \frac{1}{2} \dot{\phi}^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{dV}{d\phi} \right)^2 + \frac{d}{dt} [V(\phi)]$$

$$\frac{d\eta(t)}{d\phi(t')} = \left[\frac{d}{dt} + \frac{d^2 V(\phi(t))}{d\phi^2} \right] \delta(t-t'),$$

tehát (44) és (45) teljesül.

2. Példa; $N=2$ szuperszimmetria $D=2$ dimenzióban.
Az euklideszi hatás

$$S = \int d^2x \left\{ \partial_\mu \Phi^* \partial_\mu \Phi + \bar{\psi}_i \partial \psi + \frac{\partial V}{\partial \Phi^*} \frac{\partial V}{\partial \Phi} + \bar{\psi} \left(\frac{1-\gamma_3}{2} \right) \psi \frac{\partial^2 V}{\partial \Phi^2} + \bar{\psi} \left(\frac{1+\gamma_3}{2} \right) \psi \frac{\partial^2 V}{\partial \Phi^{*2}} \right\}.$$

A Nicolai leképezés egy (39) típusú Langevin-egyenlet formáját ölti, de most a t idő a valódi (euklideszi) x^0 idő.

$$\eta(x) = \frac{\partial}{\partial x^0} \phi(x) - \frac{\delta W}{\delta \phi^*(x)}$$

(47)

$$\eta^*(x) = \frac{\partial}{\partial x^0} \phi^*(x) - \frac{\delta W}{\delta \phi(x)},$$

ahol a $W(\Phi, \Phi^*)$ effektív szuperpotenciál definíciója

$$W = \int dx^1 \left\{ V(\Phi(x)) + V(\Phi^*(x)) + \frac{i}{2} \Phi^*(x) \frac{\vec{\partial}}{\partial x^1} \Phi(x) \right\}.$$

Bárki könnyen igazolhatja, hogy a (44), (45) egyenletek teljesülnek a (47) leképezésre is.

Természetesen óvakodnunk kell attól, hogy a fenti relációkat (kivéve a kvantum mechanikai példát) többnek tekintsük formális relációknál. Addig amíg a végtelen dimenziós függvénytéren való diffúziós folyamatot — mint (39) vagy (47) — precízen nem definiáljuk, meg kell elégednünk a (46) összefüggés perturbatív értelmezésével. Eszerint a Nicolai leképezésnek mint sztochasztikus folyamatnak a perturbatív megoldása (46) jobb oldalán előállítja a szuperszimmetrikus térelmélet korrelációs függvényeinek perturbatív sorát.

Végezetül megemlítjük a Nicolai leképezés kapcsolatát a szuperszimmetria sértéssel. A Nicolai leképezés általában csak akkor létezik, ha a szuperszimmetria ábrázolódik. Ilyenkor az $\eta = N(\phi)$ egyenlet ϕ -re való megoldásainak száma, azaz a Nicolai leképezés indexe megegyezik a Witten indexszel [9], amely tehát nem zérus. Ez pedig Witten kritériuma szerint elégséges ahhoz, hogy a SUSY ne sérüljön [10].

IRODALOM

1. *J. Iliopoulos, B. Zumino*, Nucl. Phys. B. 76, 310, 1974.
2. *S. Ferrara, O. Piguet*, Nucl. Phys. B 93, 261, 1975.
3. *S. Mandelstam*, J. Phys. Colloq. (France) 43 C—3, 331, 1982.
4. *G. Parisi, Y. Wu*, Sci. Sin (China) 24, 483, 1981.
5. *G. Parisi, N. Sourlas*, Nucl. Phys. B 206, 321, 1982.
6. *I. I. Gihman, A. V. Szkorohod*: Bevezetés a sztochasztikus folyamatok elméletébe, Műszaki Könyvkiadó Budapest, 1975.
7. *H. Nicolai*, Phys. Lett. 101B, 396, 1981.
8. *S. Cecotti, L. Girardello*, Ann. Phys. 145, 81, 1983.
9. *S. Cecotti, L. Girardello*, Phys. Lett. 110B, 39, 1982.
10. *E. Witten*, Erice Lectures 1981.

ALACSONYENERGIÁS SZUPERSZIMMETRIKUS MODELLEK

NAGY TIBOR

ELTE, ELMÉLETI Fizikai Tanszék, Budapest

I. A SZUPERSZIMMETRIKUS MÉRTÉKELMÉLETEK SZERKEZETE

Bevezetésképpen röviden összefoglaljuk a szuperszimmetrikus mértékelméleteknek a modellalkotás szempontjából lényeges tulajdonságait. A részleteket illetően [1]-re utalunk; ott található meg az eredeti munkák jegyzéke is.

Az adott elmélet szimmetrikus egy G mértékcsoporttal szemben, G generátorai a szokásos csererelációkat elégítik ki:

$$[T_i, T_k] = if_{ikl} T_l;$$

az f_{ikl} szerkezeti állandókat teljesen antiszimmetrikusnak vehetjük. Az elemi terek 0, 1/2, és 1 spinű részecskéket írnak le és G adott ábrázolásai szerint transzformálódnak. A szuperszimmetrikus elméletben a saklárók és a fermionok *chirális szupermultipletteket* alkotnak:

$$\begin{aligned} \Phi_a(x, \theta, \bar{\theta}) = & A_a(x) + i\bar{\theta}\tau^\mu\theta\partial_\mu A_a(x) - \frac{1}{4}\theta\theta\bar{\theta}\bar{\theta}\square A_a(x) + \\ & + \sqrt{2}\theta\psi_a(x) - \frac{i}{\sqrt{2}}\theta\theta\bar{\theta}\tau^\mu\partial_\mu\psi_a(x) + \theta\theta F_a(x). \end{aligned}$$

Itt az a index a tér G -vektor komponensére utal, és a Weyl-spinor szorzatok értelmezése

$$uv = \mu_\alpha \varepsilon_{\alpha\beta} v_\beta = vu,$$

$$\bar{u}\tau v = \bar{u}_\alpha \tau_{\alpha\beta} v_\beta,$$

$$\tau = (1, -\tau)$$

$$\bar{\tau} = (1, \tau),$$

ahol ε a kétindexes Levi—Civita-szimbólum, τ komponensei pedig a Pauli-mátrixok. A realiztikus modellekben rendszerint vagy csak a ψ spinor vagy csak az A skalár feleltethető meg ismert részecskéeknek; az első esetben a ψ_a fermion A_a párját *sfermionnak*, a második esetben az A_a Higgs-részecske ψ_a párját *higgsinonak* szokás nevezni. F_a nem dinamikai segédter.

A mértékbozonok G adjungált ábrázolása szerint transzformálódó *vektor-szupermultiplettbe* foglalhatók:

$$V_i(x, \theta, \bar{\theta}) = -\bar{\theta}\tau^\mu\theta V_{i\mu}(x) + \theta\theta\bar{\theta}\bar{\lambda}_i(x) + \bar{\theta}\bar{\theta}\lambda_i(x)\theta + \frac{1}{2}\theta\theta\bar{\theta}\bar{\theta}D_i(x).$$

Ez az alak *Wess—Zumino-mérték*ben érvényes és a továbbiakban mindig ezt a mértéket használjuk. A $V_{i\mu}$ vektortér $1/2$ -spinű λ_i párja az ún. *gaugino*, D_i pedig egy újabb segédter.

A térerősség-multipllett az $y^\mu = x^\mu + i\bar{\theta}\tau^\mu\theta$ változóval a következő egyszerű alakba írható:

$$W_i(y, \theta) = -i\lambda_i(y) - 4 \left[\frac{1}{2} F_{i\mu\nu}(y) \bar{\tau}^\nu \tau^\mu + iD_i(y) \right] \theta - 4\theta\theta \partial_\mu \bar{\lambda}_i(y) \tau^\mu \varepsilon;$$

ahol $F_{i,\mu\nu}(x)$ a közönséges térerősség-tenzor.

Az adjungált ábrázolás vektorai helyett a

$$V = T_i V_i, \quad W = T_i W_i \quad (\text{Tr } T_i T_k = C\delta_{ik})$$

mátrixokat használva a legáltalánosabb mértékinvariáns, renormálható Lagrange-függvény

$$L = -\frac{1}{4C} \text{Tr} \{WW|_{\theta\theta} + \bar{W}\bar{W}|_{\theta\theta}\} - \Phi^+ e^V \Phi|_{\theta\theta\theta\theta} + \xi_i V_i|_{\theta\theta\theta\theta} + \\ + \left[\left(\lambda_a \Phi_a + \frac{1}{2} m_{ab} \Phi_a \Phi_b + \frac{1}{3} g_{abc} \Phi_a \Phi_b \Phi_c \right) \right]_{|\theta\theta} + hc$$

alakú lesz, ahol λ_a , m_{ab} és g_{abc} teljesen szimmetrikus G -invariáns tenzorok. Nyilvánvaló, hogy a $\xi_i V_i$ tag csak akkor léphet fel, ha G -nek van legalább egy $U(1)$ faktora. A multipllett-szorzatok kijelölt komponenseit explicite meghatározva kapjuk

$$L = L_g + L'$$

$$L_g = -\frac{1}{4} F_{i\mu\nu} F_i^{\mu\nu} + i\bar{\lambda}_i \tau^\mu \partial_\mu \lambda_i + i\bar{\psi} \tau^\mu \left(\partial_\mu + \frac{i}{2} T_i V_{i\mu} \right) \psi + \left(\partial_\mu A + \frac{i}{2} T_i V_{i\mu} A \right)^+ \times \quad (1)$$

$$\times \left(\partial_\mu A + \frac{i}{2} T_i V_{i\mu} A \right) + \frac{1}{\sqrt{2}} (A_a^+ T_{iab} \lambda_i \psi_b - \bar{\lambda}_i \bar{\psi}_a T_{i,ab} A_b)$$

$$L' = \frac{1}{2} D_i^2 + F_a^+ F_a + \xi_i D_i - \frac{1}{2} A^+ T_i A D_i +$$

$$+ \left[\lambda_a F_a + m_{ab} \left(A_a F_b - \frac{1}{2} \psi_a \psi_b \right) + g_{abc} (A_a A_b F_c - \psi_a \psi_b A_c) + hc \right]$$

L_g egy közönséges mértékelméleti Lagrange-függvény, mértékkölcsönhatásokkal és a szuperszimmetria által generált Yukawa-csatolással, L' pedig a segédterek csatolásait tartalmazza. Innen a segédterekre a következő „téregyenletek” adódnak:

$$D_i + \xi_i - \frac{1}{2} A^+ T_i A = 0, \quad (2)$$

$$F_a^+ + \lambda_a + m_{ab} A_b + g_{abc} A_b A_c = 0.$$

A segédterek tehát kifejezhetők a dinamikai változókkal. Ha ezt a helyettesítést L' -ben

elvégezzük, kapjuk:

$$L' = L_{m,Y} - V(A).$$

$L_{m,Y}$ egy tömegtag és egy Yukawa-kölcsönhatás összege

$$L_{m,Y} = -\frac{1}{2} m_{ab} \psi_a \psi_b - g_{abc} \psi_a \psi_b A_c,$$

$V(A)$ pedig a skalárpotenciál:

$$V(A) = \frac{1}{2} D_i(A)^2 + F_a^+(A) F_a(A).$$

Az elmélet szimmetriái spontán sérülnek, ha a skalár multipliett vákuumértéke nem zérus,

$$\langle A_a \rangle_0 = z_a \neq 0.$$

A G mértékszimmetria sérülésének feltétele fa-közelítésben, hogy egy nem- G -skalár z -re

$$\frac{\partial V}{\partial A_0|_{A=z}} = 0$$

legyen. A *szuperszimmetria* ugyanebben a közelítésben akkor sérül, ha $V(z) \neq 0$; pontosabban, a spontán sértett vákuum stabilitásához az szükséges, hogy a $V(z)=0$ egyenletnek, vagy, ami ezzel ekvivalens, a $D_i(z)=0$, $F_a(z)=0$ egyenleteknek egyáltalán ne legyen megoldása. Mint *O'Raifeartaigh* megmutatta, ez elérhető, ha megfelelő, elég bonyolult skalármultipliettet választunk. Egyszerű lehetőség adódik *Fayet* és *Iliopoulos* módszerével: ha G tartalmaz legalább egy $U(1)$ faktort ($\rightarrow T_{i_0}$ generátor), a megfelelő ξ_{i_0} L -ben nullától különböző lehet, és így, mint (2)-ből látszik, a stabilitás feltétele könnyen teljesíthető.

Adott z vákuumérték esetén a következő tömegmátrixokat kapjuk:
Mértékbozonok:

$$M_{ij}^2 = \frac{1}{2} z^+ T_i^+ T_j z.$$

Fermionok:

$$-\bar{\psi} M \psi = \left(\frac{1}{2} m_{ab} + g_{abc} z_c \right) (-\psi_a \psi_b) + \frac{1}{\sqrt{2}} z_a^+ T_{i,ab} \lambda_i \psi_b + hc.$$

Skalárok:

$$\mu_{ab}^2 = \frac{\partial^2 V(A)}{\partial A_a \partial A_b|_z}.$$

Itt figyelemmel kell lennünk arra, hogy λ és ψ Weyl-spinorokat jelentenek. Összehasonlítás végett felírjuk a

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \varepsilon \bar{\chi} \end{pmatrix}$$

alakú bispinor szokásos tömegtagját kétkomponensű mennyiségekkel:

$$-m \bar{\Psi} \Psi = -m (-\chi \varphi + \bar{\chi} \bar{\varphi}).$$

Speciálisan, ha Ψ Majorana-spinor, $\varphi = \chi$. A fermionok közül tehát csak tömegben degenerált párok foglalhatók össze Dirac-részecskékké.

II. EGY EGYSZERŰ MODELL

A fentiek illusztrálására vizsgáljuk meg azt az egyszerű esetet, amikor $G=U(1)$, T generátorral, V^μ és λ vektor-supermultiplettel. Tekintsünk két chirális supermultipletet:

$$(1)\text{-ben} \quad \begin{aligned} \Phi_1(\psi_1, A_1)^{T=e}, \quad \Phi_2(\psi_2, A_2)^{T=-e} \\ m_{12} = m_{21} = -m, \quad g_{abc} = \lambda_a = 0. \end{aligned}$$

Ezzel a (2) egyenletek a következő alakot öltik:

$$D + \xi - \frac{e}{2} (A_1^+ A_1 - A_2^+ A_2) = 0$$

$$F_1^+ - m A_2 = 0,$$

$$F_2^+ - m A_1 = 0,$$

a skalárpotenciál pedig

$$\begin{aligned} V(A) = \frac{1}{2} D^2 + F_1^+ F_1 + F_2^+ F_2 = 1/2 \xi^2 + \left(m^2 - \frac{1}{2} \xi e\right) A_1^+ A_1 + \\ + \left(m^2 + \frac{1}{2} \xi e\right) A_2^+ A_2 + \frac{e^2}{8} (A_1^+ A_1 - A_2^+ A_2)^2. \end{aligned}$$

A vákuumértékeket meghatározó egyenletek:

$$\begin{aligned} \frac{\partial V}{\partial A_1^+} = A_1 \left[\left(m^2 - \frac{1}{2} \xi e\right) + \frac{e^2}{4} (A_1^+ A_1 - A_2^+ A_2) \right] = 0, \\ \frac{\partial V}{\partial A_2^+} = A_2 \left[\left(m^2 + \frac{1}{2} \xi e\right) + \frac{e^2}{4} (A_2^+ A_2 - A_1^+ A_1) \right] = 0, \end{aligned} \quad (3)$$

ahonnan következik, hogy $m^2 A_1 A_2 = 0$. Legyen $e\xi > 0$, ekkor a következő esetek lehetségesek:

1. $m^2 > \frac{1}{2} m\xi$, ekkor (3)-ból $A_1 = A_2 = 0$, tehát a mértékszimmétria nem sérül.

A segédterekre $F_1 = F_2 = 0$, $D = -\xi$ adódik, és D nem-zérus volta a szuperszimmetria sérülését eredményezi. A tömegekre kapjuk:

$$\begin{aligned} M_\psi^2 &= 0 \quad (\text{sértetlen mértékelmélet!}) \\ -\psi M \psi &= -m(-\psi_1 \psi_2 + \psi_1 \psi_2) = -\psi m \psi, \\ M_\lambda &= 0. \end{aligned}$$

$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ egy m tömegű Dirac-részecske, λ a szuperszimmetria sérülését kísérő goldstino.

2. $m^2 < \frac{1}{2} m_\xi^2$, ebben az esetben $A_2=0, A_1=z_1$, ahol

$$|z_1|^2 = \frac{2}{e^2} (\xi e - 2m^2) = z_1^2$$

G tehát sérül: ugyancsak spontán sérül a szuperszimmetria is, mivel $D=2m^2/e$, $F_1=0, F_2=mz_1$. A tömegek:

$$M_V^2 = \frac{e^2 z_1^2}{2},$$

$$\begin{aligned} -\bar{\psi} M \psi &= -m \left[-\psi_1 \psi_2 + \bar{\psi}_1 \bar{\psi}_2 - \frac{e}{\sqrt{2}} z_1 (-\lambda \psi_1 + \bar{\lambda} \bar{\psi}_1) \right] = - \\ &= - \left[- \left(m \psi_2 + \frac{e z_1}{\sqrt{2}} \lambda \right) \psi_1 + h.c. \right]. \end{aligned}$$

Bevezetve a

$$\psi'_2 = (m^2 + z_1^2 e^2/2)^{-1/2} (m \psi_2 + e z_1 / \sqrt{2} \lambda)$$

kombinációkat, és a

$$\lambda' = (m^2 + z_1^2 e^2/2)^{-1/2} (-e z_1 / \sqrt{2} \psi_2 + m \lambda)$$

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ e \psi'_2 \end{pmatrix}$$

Dirac-spinort, egy

$$M_\psi = \sqrt{m^2 + z_1^2 e^2/2}$$

tömegű Dirac-részecskét és egy $M_{\lambda'}=0$ tömegű goldstintot kapunk.

A skalárokra:

$$\mu_{\text{Re}(A_1-z_1)}^2 = \frac{e^2 z_1^2}{2}, \quad \mu_{\text{Im}(A_1-z_1)}^2 = 0,$$

$$\mu_{A_2}^2 = 2m^2.$$

Nyilván, $\text{Im}(A_1-z_1)$ a mértékszimmétria spontán sérülésével járó Goldstone-bozon.

Ahogy szuperszimmetria esetén várjuk, a vektor-, fermion- és skalártömegek nem függetlenek egymástól.

III. ALACSONYENERGIÁS REALISZTIKUS MODELLEK

A szuperszimmetrikus elméletek vizsgálatának széles körű elterjedését nem kis mértékben az a körülmény indokolja, hogy az ilyen elméletekben a nagy egyesítések hierarchia-problémája elvileg megoldható. Az említett probléma abban áll, hogy a közönséges GUT-okban két vagy több, nagyságrendekben eltérő tömegskála fellépése nem természetes: ehhez a Higgs-csatolásokat mintegy 30 jegy pontossággal össze kell hangolni, s ha ezt csak fa-szinten tesszük meg, a sugárzási korrekciók a hierarchiát teljesen elrontják. Szuperszimmetrikus (vagy közelítően szuperszimmetrikus) elmé-

letekben az azonos csatolásokkal rendelkező és (közel) azonos tömeggel rendelkező fermionok és skalárok a „veszélyes” sugárzási korrekciókban egymás járulékait kompenzálják. Ahhoz, hogy a SUSY ezt az alapvető funkcióját teljesíteni tudja, szükséges, hogy az alacsonyenergiás tömegskálához (~ 300 GeV) képest ne túlságosan erősen sérüljön. Ilyen esetben a szuperszimmetria jelentősen módosítja az alacsonyenergiás fenomenológiát, és értelme van effektív alacsonyenergiás modellek tanulmányozásának.

A realiztikus modellek felállításánál a közönséges mértékelméletekhez képest extra problémák lépnek fel. Először is, a chirális multipllett-csatolások általában a barionszám és a különböző leptonszámok sérülésére vezetnek, hacsak azt valami speciális szimmetria meg nem tiltja. Mivel köbös csatolásokról van szó, letiltásuk már diszkrét tükrözésekkel is elérhető. A

$$G_{st} = SU(3)_C \times SU(2) \times U(1)$$

standard modell esetében lényegében ez az egyetlen lehetőség. A másik probléma; hogy a SUSY által megkövetelt egzotikus részecskék többsége a tapasztalattal való összevetés alapján nem lehet kis tömegű. Annak feltétele, hogy egy fermion skalár (sfermion) párja ne legyen nála könnyebb az, hogy adott töltésű és helicitású fermionra

$$\sum_i g_i^2 D_i(z) T_i > 0$$

legyen (z a skalár vákuumérték, T_i a mértékcsoport generátora). A standard elméletben a T_3 $SU(2)$ -generátornak és az Y $U(1)$ -generátornak megfelelő D_{T_3} és D_Y különböztethető 0-tól, mivel azonban T_3 és Y spurtalan, a fenti egyenlőtlenség nem teljesülhet minden fermionra. A bevált formalizmus realiztikus S -modellesítéséhez tehát, úgy tűnik, G_{st} kiterjesztésére van szükség. Ekkor persze fellép az a probléma, hogy a kiterjesztés ne rontsa el a G_{st} által jól visszaadott alacsonyenergiás töltött és semleges-áramú fenomenológiát. A közönséges mértékelméletek körében a legegyszerűbb ilyen tulajdonságú modellek a

$$G = G_{st} \times \tilde{G}$$

direkt szorzat alakú mértékcsoportokra épülnek, ahol \tilde{G} egy megfelelően megválasztott új flavor-csoport.

Mi itt egyetlen modellel, a *Fayet-modellel* [2] foglalkozunk részletesebben, amelyben \tilde{G} egy $U(1)$ -csoport; ezen lényegében áttekinthetjük azokat a lehetőségeket és problémákat, amelyek az alacsony energián sérülő szuperszimmetria bevezetésével kapcsolatosak.

A modell mértékcsoportja (a részcsoporthoz alatt a megfelelő mérték-bozonok, gauginok és generátorok; $\alpha=1, \dots, 8$; $i=1, 2, 3$):

$$G = SU(3)_C \times SU(2) \times U(1)' \times U(1)''$$

V^μ	G_α^μ	V_i^μ	V'^μ	V''^μ
λ	λ_α	λ_i	λ'	λ''
T	$2g_s F_\alpha$	$2g T_i$	$g' Y'$	$g'' Y''$

Az extra $U(1)$ elegendőnek bizonyul mind a B - és L -sértés kizárására, mind a sfermiontömegek felemelésére. A chirális supermultipletek a következők:

$$\begin{aligned} S_a \begin{cases} s_a & \text{— slepton, skvark} \\ \psi_a^s & \text{— balkezes lepton, kvark} \end{cases} \\ T_a \begin{cases} t_a & \text{— tepton, tark} \\ \psi_a^t & \text{— balkezes antilepton, antikvark} \end{cases} \\ S \begin{cases} s & \text{— Higgs} \\ \psi^s & \text{— higgsino} \end{cases} \\ T \begin{cases} t & \text{— Higgs} \\ \psi^t & \text{— higgsino} \end{cases} \\ N \begin{cases} n & \text{— Higgs} \\ \psi^n & \text{— higgsino} \end{cases} \end{aligned}$$

S_s és T_a az ismert leptonokat és kvarkokat írja le (a végigfut a jellemző kvantumszámokon) a megfelelő nehéz skalár partnerekkel. S és T $SU(3)_c$ -szinglettek és $SU(2)$ -dublettek, N szinszinglett és $SU(2)$ -szinglett, de nem $U(1)'_x U(1)''$ skalár; S, T skalár része a szokásos Higgs, amelynek vákuummértéke adja a spontán G -sértést. N nem felel meg ismert részecskének, de szerepe van a fenomenológia kialakításában.

A szuperszimmetrikus elméletekben lehetőség van egy olyan belső szimmetriára, amely a Grassmann-változók fázistranszformációjával kapcsolatos (R -invariancia). A transzformáció az egyes terekre a következő:

$$\begin{aligned} V(\theta, \bar{\theta}) &\rightarrow V(\theta e^{-i\alpha}, \bar{\theta} e^{i\alpha}) \\ S(\theta, \bar{\theta}) &\rightarrow S(\theta e^{-i\alpha}, \bar{\theta} e^{i\alpha}) \\ T(\theta, \bar{\theta}) &\rightarrow T(\theta e^{-i\alpha}, \bar{\theta} e^{i\alpha}) \\ N(\theta, \bar{\theta}) &\rightarrow e^{2i\alpha} N(\theta e^{-i\alpha}, \bar{\theta} e^{i\alpha}) \\ S_a(\theta, \bar{\theta}) &\rightarrow e^{i(\alpha + \beta_a)} S_a(\theta e^{-i\alpha}, \bar{\theta} e^{i\alpha}) \\ T_a(\theta, \bar{\theta}) &\rightarrow e^{i(\alpha - \beta_a)} T_a(\theta e^{-i\alpha}, \bar{\theta} e^{i\alpha}). \end{aligned}$$

Ha e szimmetriát megköveteljük, elérhető, hogy a közönséges részecskék R -skalárok legyenek, míg az egzotikus részekre $R \neq 0$ és így közönséges részecskék reakcióiban csak párokban keletkezhetnek. Az L' -beli tömegtag és Yukawa-csatolás akkor R -invariáns, ha $\Phi_a \Phi_b$, $\Phi_a \Phi_b \Phi_c$ N szerint transzformálódik (minthogy $\theta \theta \rightarrow e^{-2i\alpha} \theta \theta$). Ily módon (a segédterek nélkül)

$$L' \sim m_{T_a S_b} T_a S_b + g_{TSN} T S N + g_{S T_a S_b} S T_a S_b + \bar{g}_{T T_a S_b} T T_a S_b,$$

ahol az együttthatókat még a G -invariancia megszorítja. A szimmetriasértést meghatározó (2) egyenletek:

$$D_i + \xi' \delta_{i, V'} + \xi'' \delta_{i, V''} - \frac{1}{2} A^+ T_i A = 0,$$

$$F_a^+ = -m_{ab} A_b - g_{abc} A_b A_c.$$

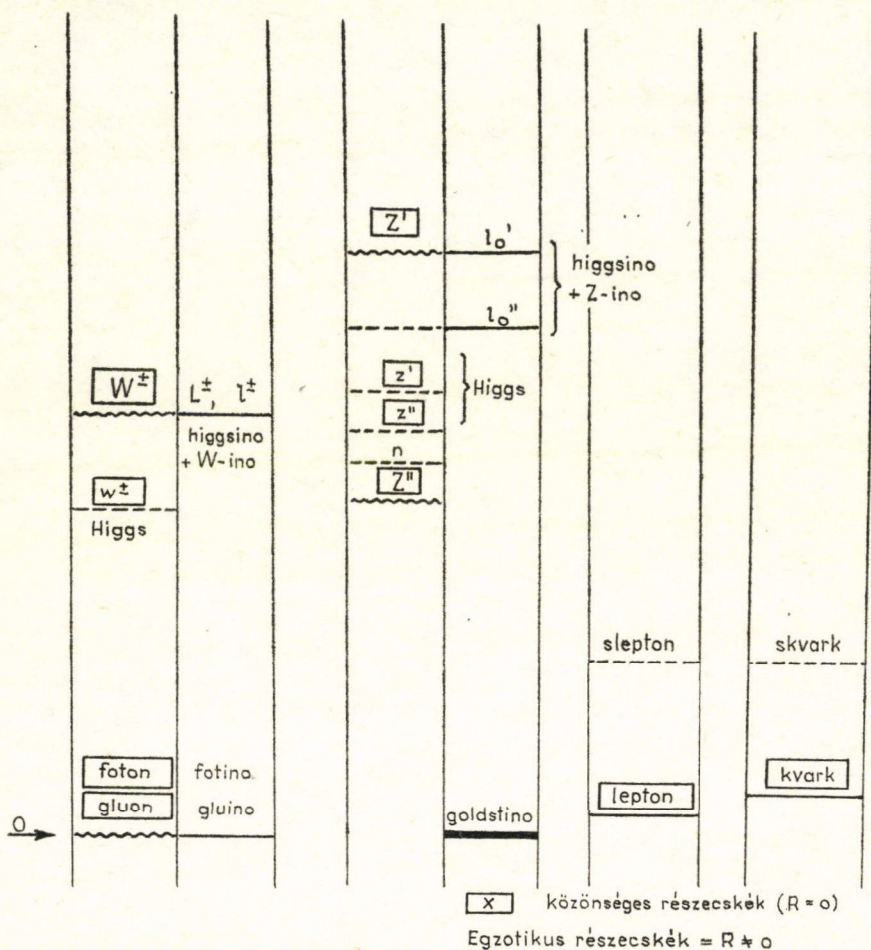
Feltéve, hogy a nem-zérus vákuumértékek

$$z_s = \langle s^0 \rangle \neq 0, \quad z_t = \langle t^0 \rangle \neq 0$$

és figyelembe véve L' alakját, adódik

$$F_a^+ = -g_{TSN} z_s z_t \delta_{a,N},$$

$$D_i = -\xi' \delta_{i,V'} - \xi'' \delta_{i,V''} - \frac{g}{2} \delta_{i,V_3} (|z_s|^2 + |z_t|^2).$$



1. ábra

z_s és z_t a mértékszimetriát $SU(3)_c \times U(1)_Q$ -ra sérti; $F_N, D_{V_3}, D_{V'}, D_{V''} \neq 0$, így a szuperszimmetria is spontán sérül. A fermiontömeg:

$$-\bar{\psi} M \psi = (m_{T_a S_b} + z_s g_{ST_a S_b} + z_t g_{ST_a S_b}) \psi_a^+ \psi_b^s + g_{TSN} (z_s \psi^t \psi^n + z_t \psi^s \psi^n) + \\ + \frac{1}{\sqrt{2}} (z_s^* \lambda_i (T_i \psi^s)_2 - z_t^* \lambda_i (T_i \psi^t)_2) + hc.$$

Innen tehát a szokott módon tömeget kapnak a töltött leptonok és a kvarkok; a $\lambda_{1,2} \sim (\lambda^- \pm \lambda^+)$ W -inok a töltött $\psi^{s,t}$ higgsinokkal két nagy tömegű töltött leptont adnak (L^-, l^-); a $\lambda_3, \lambda', \lambda''$ Z -inok, ψ^n és a semleges ψ^s, ψ^t higgsinok kombinációiból két nagy tömegű semleges Dirac-lepton ($l^{0'}, l^{0''}$) és két zérus tömegű balkezes lepton, a λ_γ fotino és a λ_G goldstino áll elő. Ugyancsak zérus tömegűek maradnak a λ_x gluinok. A teljes részecskespektrumot kvalitatíve az 1. ábra mutatja.

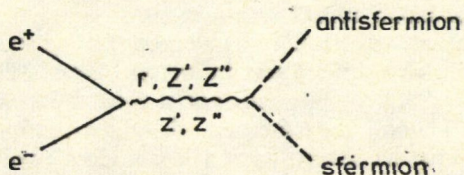
Mint látható, a nem túl erősen sérülő szuperszimmetria alaposan megváltoztatja az alacsonyenergiás viszonyokat. Kérdés, hogy mennyiben erősíti meg ezt a képet a tapasztalat. Ezen túlmenően persze fennáll a gyenge kölcsönhatások konkrét szerkezetének problémája is, vagyis meg kell vizsgálni, hogy egy ilyen modell mennyire adja vissza a standard elmélet kijelentéseit.

IV. ÖSSZEVETÉS A TAPASZTALATTAL ÉS ELVI PROBLÉMÁK

Az alábbiakban röviden vázoljuk a kísérleti ellenőrzés lehetőségeit és eddigi eredményeit, továbbá megemlítünk néhány olyan problémát, amely elvi nehézséget jelent az itt tárgyalt típusú modellek számára.

Az egzotikus részecskék közül az $L^\pm, l^\pm, l_0', l_0''$ igen nehéz leptonként viselkedik, ezekre tehát csak a legújabb nagyenergiás mérésekből várható közvetlen információ. A fotino és a goldstino kölcsönhatásai lényegében hasonlóak, mint a neutrínok semleges áramú kölcsönhatásai, így aránylag könnyebben elkerülhetik a detektálást, lényeges szerepük lehet viszont elvileg a csillagfejlődésben és a kozmikus energiasűrűség kialakításában.

Leginkább ellenőrizhetőnek látszik a helyzet a sfermionok és a gluino tekintetében. A sfermionok, tömegüktől függően, igen sok jelenségben módosító hatást gyakorolhatnak (flavor-változtató semleges áramok, atomfizikai paritásértés, $(e^+e^- \text{ hadron})/(e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-)$ arány stb. (e^+e^-) ütközésekben párban keletkezhetnek. Mivel várhatóan igen gyorsan elbomlanak fermionra és gauginora, jellegzetes végállapot jön létre nagy hiányzó semleges energiával és erős akoplanaritással. Skvarkok esetében ez a jelenség anomális jet-szerkezetre vezet. Mind ez ideig pozitív effektust



2. ábra

nem észleltek. PETRA és PEP adatok szerint

$$m(\text{slepton}) > 16 \text{ GeV}.$$

A gluino létezése együtt kell, hogy járjon egzotikus hadronok létezésével ($\bar{q}q\lambda_\alpha$, $qq\lambda_\alpha$ — R -hadronok). Bár az R -invariancia sérülése esetén a gluino tömegre tehet szert, ez a tömeg nem lehet túlságosan nagy, így az R -hadronok aránylag könnyűek. Várhatóan hadronokra és fotinora vagy goldstinora bomlanak és beam dump kísérletekben az utóbbiakkal kelthetők. Abból, hogy eddig nem figyelték meg őket, következik, hogy tömegük 3–5 GeV-nél nagyobb. Az R -invariancia spontán sérülése — ami tömeges gluino esetén a vizsgált típusú modellekben szükségszerű — egy globális $U(1)$ — szimmetria sérülését jelenti. Bár a szimmetriasértés módjától függően különféle helyzetek állhatnak elő, általában egy axion-szerű részecske lép fel, amelyet az eddigi axion-kutatások kizárnak. Egy GUT keretében az úgynevezett „csúszó vákuumérték” módszerével elérhető, hogy ez a részecske fantom-axion-szerű viselkedést mutasson. A jelenség azon alapszik, hogy egy GUT-szinglett, egy G_{st} -sértő és egy GUT-sértő Higgs-komponens együtteséből fa-szinten csak a középső kap vákuumértéket, úgy, hogy ezen a kis energiájú skálán az R -invariancia megmarad; ugyanakkor a mértékkölcsönhatások nagy szinglett- és GUT-sértő vákuumértéket adnak, amelyek az R -szimmetriát is sértik (megfordított hierarchia).

Az $U(1)'$ és $U(1)''$ csoportok a standard $U(1)$ és egy extra $\tilde{U}(1)$ kombinációi. Az extra $\tilde{U}(1)$ különféle problémákat vet fel. Ha S_a és T_a csak az ismert fermionokat foglalja magába, az $\tilde{U}(1)$ -áram anomális. Újabb színes és töltött szuperterek hozzáadásával az anomália kiküszöbölhető, ilyenkor azonban a skalár potenciálnak szuperszimmetrikus minimuma van és a SUSY nem sérül spontán. Egyelőre nem világos, található-e olyan modell, amelyben a háromszög-anomália nem lép fel, a sfermion-tömegek nagyra tehetőek és a szuperszimmetria spontán sérül. A másik probléma, hogy a Z'' semleges gyenge bozon a standard modellhez képest új semleges áramú jelenségeket ad, amelyekre a tapasztalat nem utal. Egy lehetséges kiutat jelent Fayet-nak az a feltevése, hogy az $U(1)$ -csatolás nagyon kicsiny; ekkor az extra effektusok erősen el lennének nyomva.

Ha extra $U(1)$ nincs, az utóbbi problémák nem lépnek fel, de visszajönnek a standard elmélet nehézségei a kis sfermion-tömegekkel. A fenomenológia helyretervására alkalmasak lehetnek a lágy (tehát explicit szuperrenormálható) SUSY-sértésen alapuló modellek, amelyekre Dimopoulos és Georgi [3] tett javaslatot. Ha azonban ilyen elméleteket megengedünk, a szuperszimmetria esztétikailag sokat veszít értékéből.

Elképzelhető, hogy a vázolt elvi nehézségek valamilyen speciális modellben megkerülhetők. Nem valószínű azonban, hogy az alacsonyenergiás elméletekben meg lehetne szabadulni a nem túl nagy tömegű egzotikus részecskéktől. Ezt tekintetbe véve a standard energiaskálán sérülő szuperszimmetria ügye a tapasztalattal való összevetés alapján meglehetősen rosszul áll: sleptonoknak, skvarkoknak, fotinonak, gluinonak semmi jele. Ha valaki a szuperszimmetria bevezetésétől az elmélet logikái „kompaktifikálódását” várta, voltaképpen már a tapasztalat visszautasításától függetlenül csalódottságot kellett, hogy érezzen. A szupermultiplettek szerepe akkor lett volna igazán esztétikus, ha ismert, vagy a közönséges elméletekben korábban is posztulált különböző spinű részecskéket egyesítettek volna magukban — ez a realisztikus modellekben nem történik meg, a spektrum egyszerűen megduplázódik.

Természetesen, ha a szuperszimmetria jóval magasabb energiaskálán sérül, a lehetőségek továbbra is nyitva maradnak, annál is inkább, mivel a megfelelő modellek alacsonyenergiás következményei jóval kevésbé explicitek. Mindenesetre, ekkor a hierarchia-probléma megoldására vonatkozó eredeti egyszerű elképzelések háttérbe szorulnak és a vizsgálatok az itt elmondottaktól meglehetősen eltérő gondolatkörben mozognak.

IRODALOM

1. *Gálf* L., Ebben a kötetben.
2. *P. Fayet*, Nucl. Phys. *B90*, 104, 1975. Phys. Letters, *69B*, 489, 1977.
3. *S. Dimopoulos* és *H. Georgi*, Nucl. Phys., *B193*, 150, 1981.

SZUPERSZIMMETRIKUS NAGY EGYESÍTÉSEK

VECSERNYÉS PÉTER

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Matematikai Intézet,
Budapest

A szuperszimmetrikus nagy egyesítések két olyan típusát vizsgáljuk, amelyekben természetes gauge-hierarchiát kaphatunk. Az egyik esetben a szuperszimmetria nem-perturbatív, a másikban fagráfszinten sérül, de mindkettőben alacsony energián. Mindkét esetben főleg a gauge-hierarchia lehetséges generálásával foglalkozunk.

1. BEVEZETÉS

Az elmúlt években sok kísérlet történt az ismert kölcsönhatások egyesítésére. Az egyszerű mértékcsoporton alapuló spontán sértett mértékelméletek, a *nagy egyesítések* [1] a következő jó tulajdonságokkal rendelkeznek:

- alacsonyenergián visszaadják a *standard modellt*;
- egy vektorcsatolási állandójuk van;
- az elektromos töltés kvantáltóságát magyarázzák;
- az alacsonyenergiás kölcsönhatások csatolási állandójának különbözőségét kvalitatíve és kvantitatíve magyarázzák;
- a gyenge keveredési szöget ($\sin \theta_w$) helyesen adják meg.

A jelenlegi kísérletek még nem döntöttek, hogy a nagy egyesítések által jósolt $\sim 10^{31}$ évnnyi protonélettartam az elmélet helyes jóslatai közé tartozik-e.

Ezen elméletek hiányosságai és negatívumai:

- az egyesítés nem teljes, hiszen a Yukawa-csatolások és a Higgs-csatolások az egyetlen vektorcsatolási állandótól függetlenek;
- a fermioncsaládok létét nem magyarázzák;
- a fermiontömegspektrum csak „kézzel” állítható be;
- az elmélet nem természetes.

Ez utóbbi azt jelenti, hogy a különböző kölcsönhatások skálája közötti nagy arány ($\sim 10^{13}$) nem stabil az elmélet paramétereinek megválasztásával szemben. Ilyen nagy *hierarchia* fönntartásához bizonyos paraméterek ~ 30 jegyre történő beállítása szükséges. A probléma a skalárbozonok jelenlétére vezethető vissza. A standard csoport sértését adó GUT-multipllettbeli Higgs-dublett tömegskálája a gyenge kölcsönhatás skálája. A multipllett további bozonjainak a leptokvark gaugebozonokhoz hasonlóan a gyors protonbomlás elkerülése végett szupernehezeknek kell lenniük. Skalárokra azonban nincs olyan szimmetria, amely lehetővé tenne ilyen nagy természetes tömegarányt, vákuumértékarányt. Ezenkívül a ~ 30 jegyre megadott paraméterek segítségével fagráfszinten beállított tömegskála-hierarchiát a perturbációs számítás minden rendjében újra be kell állítani.

- A nagy egyesítések két említett hiányosságán segít a szuperszimmetria. Ugyanis
- amíg a szuperszimmetria sértetlen, addig a fermionokra vonatkozó chirális szimmetria, a szuperpartner skalárok, a sfermionok tömegére is megszorítást tehet;
- szuperszimmetrikus elméletekben gráfkiejtések folytán kevesebb független divergenciatípus van mint a szokásos mértékelméletekben; ennek egyik következménye az a tény, hogy a fagráfszinten beállított skalártömeg-arányok nem renormálódnak [2], másrészt kevesebb független csatolási állandó van, hiszen a Yukawa- és a skaláröncsatolások összefüggnek [5].

A továbbiakban a szuperszimmetrikus nagy egyesítéseket tárgyaljuk. A fejezetek a következőképpen tagolódnak: a II. fejezetben a lehetséges szuperszimmetriák kiválasztását vizsgáljuk, a III. és a IV. fejezetben azokkal a szuperszimmetrikus nagy egyesítésekkel foglalkozunk, ahol a szuperszimmetria perturbatív sértetlen, nem-perturbatív sékül, illetve fagráfszinten sékül.

II. MILYEN SZUPERSZIMMETRIÁT VÁLASSZUNK?

A lokálisan szuperszimmetrikus modellek a gravitációt is leírják, ezek az ún. supergravitáció elméletek [3]. Ezért a Planck-tömeg alatti energiatartományokban valószínűleg csak a globális szuperszimmetria a releváns szimmetria, hiszen a gravitáció csak a Planck-tömegnél válik részecskefizikai szempontból jelentős kölcsönhatássá. Globálisan szuperszimmetrikus modellekben pedig, ha el akarjuk kerülni az alacsonyenergiás fermionok számának megduplázását, csak az $N=1$ modellek realizáltak, a kiterjesztett ($N>1$) szuperszimmetriával rendelkező modellek nem. Ezt a következők miatt állíthatjuk:

A standard modellben a balkezes (per. def. $1/2$ helicitású) és a jobbkezes (per. def. $-1/2$ helicitású) fermionok a gauge-csoport inekvivalens ábrázolásához tartoznak, így a fermionábrázolás *komplex*. Globális $N>1$ szuperszimmetria esetén egy szuperszimmetria-multiplett tartalmazza vagy a $(-\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ vagy az $(1, \frac{1}{2}, 0)$ helicitástartalmú multiplettet. Tehát vagy megegyezik a balkezes és jobbkezes fermionok ábrázolása, vagy a vektorbozonokkal egy multiplettben lévén, adjungált ábrázolásban vannak. Ez mind *valós* ábrázolás a fermionokra nézve.

Mivel $N' \rightarrow N$ sértés ($N'>N$) csupán lokális szuperszimmetria esetén lehetséges, a fenti feltevésből az is következik, hogy az $N \neq 1$ elméletek csak olyan energiatartományban relevánsak, ahol a gravitáció is az. Így mi az $N=1$ globális szuperszimmetria esetével foglalkozunk.

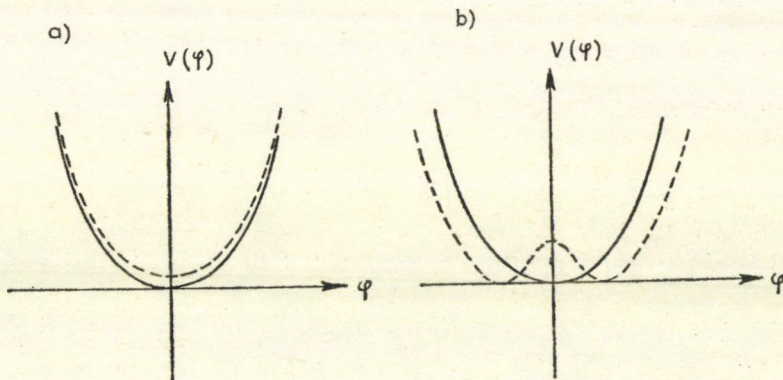
Mivel a természetben létező bozonok és fermionok között tömegdegenerációt nem figyelhetünk meg, a szuperszimmetriának sérülnie kell. Ezzel kapcsolatosan két kérdésre kell felelnünk: milyen energiaskálán és milyen módon sékül a szuperszimmetria?

A séülés történhet a Planck-tömeg, a nagy egyesítési tömeg környékén, de ekkor az alacsonyenergiás elméletben csupán indirekt utalásokat kapunk elméletünk szuperszimmetrikus voltára. Azonban egy nagy egyesítés természetes voltát, csak legfőbb a gyenge kölcsönhatások skálája körül séülő szuperszimmetria biztosítja, így mi ezen elméleteket vizsgáljuk. Ilyen skálájú sétés esetén kapjuk az ún. alacsony-

energiás szuperszimmetrikus modelleket [4]. Az ilyen modellek keretei közé eső alacsonyenergiás jöslatokkal nem foglalkozunk, csak az elmélet nagy egyesítés voltából következő eredményekkel.

A szuperszimmetria sérülhet *fagráfszinten* [5]. Ekkor meg kell magyaráznunk, hogy a szuperszimmetria-sértés skálája miért olyan kicsi a nagy egyesítési skálához képest. Kvantummechanikai példák azt implikálják [6], hogy fagráfszinten sértetlen szuperszimmetriát csak nem-perturbatív, dinamikailag lehet sérteni, perturbatív nem. Így a szuperszimmetria sértési skála alacsony voltát perturbatív effektusokból nem vezethetjük le. Ha azonban azzal az általánosan elfogadott feltevessel élünk, hogy a szuperszimmetria sértetlen (sértett) volta ekvivalens a vákuumenergia zérus (nemzérus) voltával, akkor a következő észrevételt tehetjük [6]: ha az effektív potenciál minimuma zérus, akkor a szuperszimmetria sértetlen. Ha azonban valamilyen nem-perturbatív effektus a potenciál minimumát tetszőlegesen kicsit is elmozdítja zérusról, akkor a szuperszimmetria sérül. Tehát a sértetlen szuperszimmetria instabil, és ez magyarázhatja a *nem-perturbatív sérülés* skálájának alacsony voltát. Az alábbi ábra mutatja, hogy a belső szimmetriák esetén nem ez a helyzet. Itt a terekben másodrendű tag együtthatóját kell pozitívról negatívra változtatni, hogy sértett belső szimmetriát kapjunk. Ez tetszőlegesen kis korrekcióval nem tehető meg.

A fentiek értelmében, a továbbiakban $N=1$, globálisan szuperszimmetrikus nagy egyesítéseket fogunk vizsgálni. Először az alacsony energián, nem-perturbatív sértett szuperszimmetria esetét tárgyaljuk, majd a spontán, fagráfszinten, de ugyancsak alacsony energián sértett esetet.



1. ábra. a) szuperszimmetria sérülése; b) belső szimmetria sérülése. A folytonos vonal jelöli a sértetlen, a szaggatott a sértett szimmetria esetében a skálárpotenciált. Az a) esetben a „sértetlen” potenciálhoz tetszőlegesen közeli függvényalak esetén is kaphatunk sértést, míg a b) esetben ez nem igaz.

III. NAGY EGYESÍTÉSEK DINAMIKAILAG SÉRTETT SZUPERSZIMMETRIÁVAL

Mivel nagy egyesítéseket vizsgálunk, a belső szimmetriákra a következő sértési lépcsőt szeretnénk:

$$G_{\text{GUT}} \rightarrow \dots \rightarrow G_S \rightarrow G_0, \quad (3.1)$$

ahol G_{GUT} a nagy egyesítési, $G_S = SU(3) \times SU(2) + U(1)$ a standard, $G_0 = SU(3) \times U(1)$ a végső sértetlen mértékcsoportot jelöli. A szimmetriasértések — ha külön nem állítjuk ennek ellenkezőjét — spontán sértések. A szuperszimmetria sértése G_S sértési skálája körül, ~ 1 TeV-nél történik. Ez valamilyen nem-perturbatív módon megy végbe, ennek mechanizmusát nem kutatjuk. (Megemlítjük, hogy ez történhetne G_S dinamikai sértésével összefüggésben.) Ahhoz, hogy a szuperszimmetria ~ 1 TeV-ig sértetlen maradjon a skalárpotenciálnak, $V(\varphi, \varphi^+)$ -nek a G_{GUT} -sértő, szuperszimmetria-őrző minimumait kell felkutatnunk. Először röviden ezzel a problémával általánosan foglalkozunk, majd egy konkrét szuperszimmetrikus nagy egyesítésen tanulmányozzuk az ilyen sértési típussal rendelkező modellek fő jóslatait és problémáit.

Mivel G_{GUT} egyszerű csoport, így a vektormultiplétből jövő D_ξ tag, nem lévén G_{GUT} skalár, nem szerepelhet a Lagrange-függvényben. Tehát a sértés csak O'Rai-feartaigh-módon történhet [5]. A skalárpotenciál alakja ebben az esetben [5]:

$$V(\varphi, \varphi^+) = \sum_i \left| \frac{\partial W(\Phi)}{\partial \Phi_i} \right|_{\Phi=\varphi}^2 + \sum_\alpha |D_\alpha(\varphi)|^2, \quad (3.2)$$

ahol

$$W(\Phi) = a_i \Phi_i + a_{ij} \Phi_i \Phi_j + a_{ijk} \Phi_i \Phi_j \Phi_k \quad (3.3)$$

a $\Phi_i, i=1, \dots, n$ chirális szuperterekből fölépített szuperpotenciál, míg

$$D_\alpha(\varphi) = (\varphi, t_\alpha \varphi). \quad (3.4)$$

$t_\alpha; \alpha=1, \dots, \dim G_{\text{GUT}}$ a megfelelő ábrázolásban levő generátorok, φ_i a Φ_i szuperterben szereplő skalártér. Sértett belső szimmetriát és sértetlen szuperszimmetriát olyan skalár-vákuumértékkel — λ_i — érhetünk el, amely kielégíti a következő két feltételt:

- i) $V(\lambda, \lambda^+) = 0$ — a szuperszimmetria sértetlen,
- ii) $t_\alpha \lambda \neq 0$ valamely t_α -kra — a megfelelő belső szimmetria spontán sérül.

Vizsgáljuk meg milyen követelményekkel jár ezen feltételek teljesülése.

Mivel a potenciálban — 3.2 — mindkét tag nemnegatív, ezért a potenciálmínimum zérus voltához mindkét tag zérus volta szükséges:

$$(A) \quad D_\alpha(\lambda) = 0; \quad \alpha = 1, \dots, \dim G_{\text{GUT}} \quad (3.5)$$

$$(B) \quad \left. \frac{\partial W}{\partial \Phi_i} \right|_{\Phi_i=\lambda_i} = 0; \quad i = 1, \dots, \dim t_\alpha. \quad (3.6)$$

A sértetlen szimmetriák \mathcal{A}_λ részalgebrájához tartozó generátorok az (A) feltételt triviálisan kielégítik, hiszen rájuk $t_\alpha \lambda = 0$. Ha olyan, nem a részalgebrához tartozó generátort veszünk, amelyik nem \mathcal{A}_λ -szinglett, akkor a Wigner—Eckart-tétel miatt

kapjuk, hogy $(\lambda, t_\alpha \lambda) = 0$, hiszen λ \mathcal{A}_λ -szinglett. Ezért, G_λ -val jelölve a λ vákuumérték kicsoportját, kimondhatjuk a következő lemmát [7]:

Lemma I. Ha G/G_λ nem tartalmaz G_λ -szinglettet, akkor

$$(\lambda, t_\alpha \lambda) = 0; \quad \alpha = 1, \dots, \dim G_{\text{GUT}}.$$

Persze ez a feltétel nem szükséges $D_\alpha(\lambda)$ zérus voltához. De ha G/G_λ tartalmaz G_λ szinglettet, akkor az A feltételt csak úgy tudjuk kielégíteni, hogy a szinglett generátorokra $t_\alpha \lambda = 0$. Ez előfordulhat például úgy, hogy t_α reducibilis, és kiejtés történik az irreducibilis részek között. Egy másik lehetőséget fogalmazunk meg a következő lemmában [7]:

Lemma II. Ha létezik egy olyan G -invariáns $P(\Phi)$ polinom, hogy

$$P_i(\lambda) := \left. \frac{\partial P}{\partial \Phi_i} \right|_{\Phi_i = \lambda_i} = c \cdot \lambda_i^+ \quad (3.7)$$

(ahol c egy konstans), akkor $(\lambda, t_\alpha \lambda) = 0$.

Az állítás nyilvánvaló, hiszen

$$c \cdot (\lambda, t_\alpha \lambda) = \left. \frac{\partial P}{\partial \Phi_i} \right|_{\Phi_i = \lambda_i} \cdot t_{\alpha, ij} \varphi_j = 0 \quad (3.8)$$

a P polinom G -invariáns volta miatt.

Foglalkozzunk most a (B) feltétellel. Itt már csak az (A) feltételnek eleget tevő vákuumértékeket vizsgáljuk, pontosabban a második lemmában megfogalmazott elégséges feltételnek eleget tevőket. A $W(\Phi)$ szuperpotenciál (3.3) alakjából nyilvánvaló, hogy W első-, másod-, illetve harmadrendű G_{GUT} invariánsok lineárkombinációja. Így ha a $P(\Phi)$ invariáns is szerepel ezek között, akkor a szuperpotenciálból jövő tag a (3.2) skalárpotenciálhoz nem eltűnő tagot ad, hiszen

$$\left. \frac{\partial W}{\partial \Phi_i} \right|_{\Phi_i = \lambda_i} = c \lambda_i^+ + \text{egyéb tagok.}$$

Így az, hogy a szuperpotenciál szélső értékét $\Phi_i = \lambda_i$ -nél vegye föl, vagyis, hogy a (B) feltétel teljesüljön, a következő feltevések valamelyikével érhető csak el:

a) a szuperpotenciálban levő több invariáns deriváltja egyenként ugyan nem zérus, de egymást kiejtik;

b) csak harmadrendűnél nagyobb (3.7) tulajdonságú invariáns van, így ez a szuperpotenciálban nem szerepelhet az elmélet renormálhatósága végett;

c) valamilyen fizikai megszorítás miatt (pl. valamilyen globális szimmetria folytán) ilyen tag nem szerepelhet a szuperpotenciálban.

A fenti állítások segítségével a különböző unitér, ortogonális és kivételes csoportokon alapuló szuperszimmetrikus nagy egyesítések lehetséges sértési sémája az ábrázolások ismeretében részletesen föltérképezhetők [7], itt mi csak egy konkrét szuperszimmetrikus $SU(5)$ modellel [8] foglalkozunk.

A modellben $SU(5) \rightarrow G_s = SU(3)_c \times SU(2) \times U(1)$ sértést akarunk úgy, hogy a szuperszimmetria ne sérüljön. Vizsgáljuk meg, hogy elérhető-e ez a szokásos $SU(5)$ modelleknek megfelelő, adjungált ábrázolásban levő chirális szupermultiplettel (Φ).

Mivel $SU(5)/G_S$ -ben nincs G_S -szinglett, így az (A) föltétel teljesül. Az adjungált ábrázolásban levő Φ -beli skalármultiplettet fölfoghatjuk mint egy 5-rendű komplex spúrtalan mátrixot: φ^{xy} ; $x, y = 1, \dots, 5$. Ha ezt fölbontjuk egy hermitikus és egy antihermitikus mátrix összegére,

$$\varphi = H + A; \quad H^+ = H, \quad A^+ = -A, \quad (3.9)$$

akkor a (3.5)-ben szereplő $D_\alpha(\varphi)$ tag a következőképpen írható:

$$\begin{aligned} D_\alpha(\varphi) &= (\varphi, t_\alpha \varphi) = \text{Tr}[(A - H)(t_\alpha(A + H) - (A + H)t_\alpha)] = \\ &= \text{Tr}[2t_\alpha(HA - AH)]. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Ha $D_\alpha(\lambda) = 0$, akkor λ_A és λ_H szimultán diagonalizálható, azaz

$$\lambda = \lambda_A + \lambda_H = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, \lambda_5); \quad \lambda_i \in \mathbb{C}, \quad i = 1, \dots, 5, \quad (3.11)$$

ahol

$$\sum_{i=1}^5 \lambda_i = 0. \quad (3.12)$$

A Φ chirális szupermultiplettből fölépíthető legáltalánosabb szuperpotenciál:

$$W(\Phi) = \frac{1}{2} b \cdot m \text{Tr} \Phi^2 + \frac{1}{3} b \cdot \text{Tr} \Phi^3. \quad (3.13)$$

Ezért

$$\left. \frac{\partial W}{\partial \Phi^{xy}} \right|_{\Phi=\lambda} = \begin{cases} 0, & \text{ha } x \neq y \\ b \cdot m \lambda_x + b \left(\lambda_x^2 - \frac{1}{5} \sum_{j=1}^5 \lambda_j^2 \right), & \text{ha } x = y. \end{cases} \quad (3.14)$$

Ha $\frac{1}{5} \sum_{j=1}^5 \lambda_j^2 = \lambda_0^2$, akkor a (B) feltétel teljesülése a

$$\lambda_x^2 + m \lambda_x - \lambda_0^2 = 0, \quad x = 1, \dots, 5 \quad (3.15)$$

egyenletrendszer megoldásával biztosított. Az azonos alakú egyenletek miatt a megoldások könnyen nyerhetők:

$$1) \quad \lambda_x = 0, \quad x = 1, \dots, 5;$$

$$2) \quad \lambda_x = \frac{m}{3}, \quad x = 1, \dots, 4; \quad \lambda_5 = -\frac{4}{3} m;$$

$$3) \quad \lambda_x = 2m, \quad x = 1, \dots, 3; \quad \lambda_x = -3m, \quad x = 4, 5.$$

Az 1), 2), illetve 3) esetnek megfelelő sértetlen szimmetriák rendre $SU(5)$, $SU(4) \times U(1)$, illetve $SU(3) \times SU(2) \times U(1)$. Sajnos a potenciál minimuma mindhárom esetben zérus, így a szuperszimmetrikus alapállapot degenerált. Mivel nekünk csupán a 3) esetbeli sértési séma a megfelelő, azt várjuk, hogy a nem-perturbatív szuperszimmetria-sértéssel együtt mindhárom sértetlen részcsoporthoz tovább sérül G_0 -ra, de legkevesbé — legkisebb vákuumértékkel — a standard csoport. Így megkaphatnánk a kívánt hierarchiát. A sértés nem-perturbatív jellege miatt persze jelenleg ez csupán elvárás.

Vizsgáljuk meg röviden az elmélet további részecsketartalmát, fenomenológiai jóslatait. A szokásos fermionokat a fermion-családoknak megfelelő három ($5^* + 10$)

reducibilis $SU(5)$ -ábrázolásban levő chirális supermultiplett ($F_i, i=1, 2, 3$) tartalmazza. A $G_S \rightarrow G_0$ sértést adó 5-plett Higgs-bozonokat egy $(5+5^*)$ $SU(5)$ -ábrázolásban levő chirális multiplettbe (H) tesszük. A figyelembe vett szuperpotenciál:

$$W(\Phi, F, H) = \frac{1}{2} b m \cdot \text{Tr} \Phi^2 + \frac{1}{3} b \text{Tr} \Phi^3 + c \cdot H_x (\Phi_y^x + 3m' \delta_y^x) \cdot H^y + f_{jk} H_x F_j^{xy} F_{ky} + \\ + g_{jk} \cdot \varepsilon_{uvwxy} H^u F_j^{vw} F_k^{xy}, \quad (3.16)$$

ahol $x, y, u, v, w=1, \dots, 5$ $SU(5)$ indexek $j, k=1, 2, 3$ fermioncsaládindexek. Ez a potenciál persze nem a fölrítható legáltalánosabb, hiszen az F terekben páratlan invariánsokat nem tartalmazza. Ez megfelelő globális szimmetriával elérhető, tényleges fizikai indoka a gyors protonbomlás elkerülése. Emiatt kell egyébként az 5-plett Higgs-bozonokat az F -től különböző chirális supermultiplettbe tenni.

Az 1), 2), 3) megoldások a jelenlegi (3.16) szuperpotenciál esetén $\langle \varphi_H \rangle = \langle \varphi_F \rangle = 0$ -val együtt most is megoldásai a potenciál minimumának.

A H -beli $SU(2)$ dublett Higgs-bozonok ($\varphi_{H4}, \varphi_{H5}$), (φ_H^4, φ_H^5) tömegnégyzete $(m-m')^2$ -tel, az $SU(3)$ triplett bozonoké m^2 -tel arányos. Mivel az $\frac{m'}{m}$ arány nem renormálódik, így az $m' = m + o(M_W)$ paraméter választással — M_W a gyenge kölcsönhatás skálája —, *technikailag természetes* tömeghierarchiát tudunk beállítani a protonbomlást okozó szintriplett és a gyenge dublett skalárbozonok tömege közt, azaz a perturbációs számítás további rendjeiben nem kell újra beállítani ezt az arányt.

További pozitívuma a szuperszimmetrikus $SU(5)$ elméletnek a helyesen megadott gyenge keveredési szög: a nagy egyesítési tömegre $M_{\text{GUT}} \approx 10^{17}$ GeV-et kapunk, amelyik két nagyságrenddel nagyobb a nem-szuperszimmetrikus $SU(5)$ modell jóslatánál, és így jobban megfelel a protonbomlásból kapott korlátoknak. A nagyobb érték a futó csatolások lassabb változásának következménye, amit a könnyű gauge-bozonoknak megfelelő szuperpartner fermionok, a gauginok okoznak. Ez a tömegskálaemelkedés általános tulajdonsága a szuperszimmetrikus nagy egyesítéseknek.

Sajnos az elmélet az alacsonyenergiás szuperszimmetrikus modellek [4] problémáját nem küszöböli ki: nem tud elég nagy tömeget adni bizonyos szuperpartner részeckeknek, hogy igazolja ezen részek eddig nem-megfigyelt voltát.

Bevezethetünk nem-perturbatív sértést imitáló explicit, lágy* szuperszimmetriasértést okozó tagokat is, hogy javítsunk elméletünk fenomenológiai jóslatain. Ha szerencsénk van, a nem-perturbatív sértés pont ilyen tagokat ad:

- i) pozitív tömegnégyzetű tagokat az F -beli skalároknak,
- ii) tömegtagot a H -beli fermionoknak,
- iii) nagy Majoranna-tömeget a gauge-fermionoknak,
- iv) negatív tömegnégyzetű tagokat a Φ multiplett bozonjaira.

Az i)–iii) tagok növelik a kis tömegű, nem megfigyelt részek tömegét, míg iv) a $G \rightarrow G_S$ sérülés kiválasztását végezheti el. Ezek persze csupán lehetőségek. Hogy a nem-perturbatív sértés valóban ilyen típusú tagokat hoz be, és így teszi alacsony energián is realiztikussá a nem-perturbatív sértett szuperszimmetrikus nagy egyesítéseket, arra egyelőre semmilyen indikáció nincs.

* Ezek olyan szuperszimmetria-sértő kölcsönhatást leíró tagok a Lagrange-függvényben, amelyekben a térszorzatok dimenziója kisebb mint négy.

IV. NAGY EGYESÍTÉSEK FAGRÁFSZINTEN SÉRTETT SZUPERSZIMMETRIÁVAL

Az előző fejezetben tárgyalt egyesítésekkel ellentétben most olyan egyesítéseket vizsgálunk, ahol a szuperszimmetria spontán, fagráfszinten sérül, bár szintén alacsony energián. Persze akkor meg kell magyaráznunk ezen skála kicsinységét a nagy egyesítési tömeghez képest. A *Witten* által javasolt mechanizmus [9] nem ezt magyarázza meg, hanem fordítottját: miért nagy a nagy egyesítési tömeg a szuperszimmetria-sértési skálához képest. Ezért a mechanizmust „fordított hierarchiának” is hívják, ahol tehát a nagy egyesítési skálát fogjuk „dinamikailag” generálni, és nem a szuperszimmetria-sértést, mint ezt az előző fejezetbeli egyesítéseknél tettük.

A mechanizmus működését egy egyszerű modellen szemléltetjük. Vizsgáljunk csupán $U(1)$ szimmetriával rendelkező skalár szupertereket: A, X, Y , de a nagy egyesítésekre gondolva ne foglalkozunk a Fayet—Iliopoulos-féle [5] szuperszimmetria-sértési mechanizmussal. Ekkor a szuperszimmetria-sértés csak az O’Raifeartaigh módon történhet. Ehhez a skalárpotenciálnak mindenütt pozitívnak kell lennie. Vizsgáljuk a következő szuperpotenciált:

$$W(A, X, Y) = a \cdot X(A^2 - m^2) + b \cdot Y \cdot A. \quad (4.1)$$

Mivel a szimmetriacsoport $U(1)$, ha eltekintünk a Fayet—Iliopoulos-féle „D-tag”-tól [5], a skalárpotenciál csupán a $\left| \frac{\partial W}{\partial \Phi_i} \right|_{\Phi=\phi}^2$ tagokból jön*. Ha $\varphi_A, \varphi_X, \varphi_Y$ -nal jelöljük a megfelelő szuperterekbeni skalártereket, akkor

$$V(\varphi_A, \varphi_X, \varphi_Y) = a^2 |\varphi_A^2 - m^2|^2 + |b\varphi_Y + 2a\varphi_A\varphi_X|^2 + b^2 |\varphi_A|^2. \quad (4.2)$$

Ez tényleg nem tűnik el sehol, tehát a szuperszimmetria sérül. Minimuma $\langle \varphi_A \rangle = 0$ -nál vagy $\langle \varphi_A \rangle = \left(m^2 - \frac{b^2}{2a^2} \right)^{\frac{1}{2}}$ -nél van, attól függően, hogy $\frac{b}{am}$ nagy vagy kicsi. Azonban mindkét esetben $\langle \varphi_X \rangle$ és $\langle \varphi_Y \rangle$ nem egyértelműen meghatározott, a

$$\langle \varphi_Y \rangle = -\frac{2a}{b} \langle \varphi_A \rangle \cdot \langle \varphi_X \rangle \quad (4.3)$$

egyenletnek eleget tevő $\langle \varphi_X \rangle, \langle \varphi_Y \rangle$ vákuumérték jó megoldás a potenciál minimum-helyére. Foglalkozunk a $\langle \varphi_A \rangle = 0$ esettel.

A φ_A tér tömege — a vákuumérték leválasztása után — kb. $2a\langle \varphi_X \rangle$, így mivel $\langle \varphi_X \rangle$ tetszőlegesen nagy is lehet, tetszőlegesen nagy tömegskálákat hozhatunk létre. Csak a magasabb rendű korrekciók rögzítik a $\langle \varphi_X \rangle$ értéket és ezáltal a tömegskálát. Az effektív potenciálhoz adódó egyhurokjárulék:

$$V^{(1)}(\varphi) = \sum_i \frac{(-1)^{F_i}}{64\pi^2} M_i^4(\varphi) \cdot \ln \frac{M_i^2(\varphi)}{\mu^2}, \quad (4.4)$$

* Megjegyezzük, hogy ebben az esetben a modellnek muszáj gauge-szinglett chirális szupermultiplettet is tartalmaznia, hiszen egyébként a $\langle \varphi \rangle = 0$ vákuumérték szuperszimmetrikus minimumot is adna.

ahol M_i az i -edik állapot fagráfszintű tömege, μ renormálási tömeg, $(-1)^{F_i}$ fermionokra -1 , bozonokra 1 faktort ad. Az egyhurokjárulék φ_X -től való függése, nagy φ_X -re, a nehéz tömegű terektől, tehát φ_A -tól és szuperpartneréből adódik. Mivel az A -beli fermion tömegének négyzete $4a^2|\langle\varphi_X\rangle|^2 + 2b^2$, az A -beli valós skalárok tömegnégyzetei pedig $4a^2|\langle\varphi_X\rangle|^2 + 2b^2 \pm 2m^2a^2$ a skalárpotenciál φ_X függése egyhurokközelítésben:

$$V(\varphi_X) = a^2 m^4 \left(1 + \frac{a^2}{8\pi^2} \left[\ln \frac{|\varphi_X|^2}{\mu^2} + o(1) \right] \right). \quad (4.5)$$

Itt a logaritmus előjele pozitív, tehát a potenciál minimuma nem nagy $\langle\varphi_X\rangle$ értéknél lesz. Mértékelméleteknél azonban a gauge-multipllett miatt a következő egyhurokközelítést kapjuk az effektív potenciálra:

$$V(\varphi_X) = \alpha \cdot a^2 m^4 \left[1 + (\beta a^2 - \gamma e^2) \ln \frac{|\varphi_X|^2}{\mu^2} + o(1) \right], \quad (4.6)$$

ahol a skalár-, e mértékcsatolás, míg α, β, γ pozitív konstansok. Ha $\beta a^2 - \gamma e^2$ negatív, a potenciál minimuma tetszőlegesen nagy $\langle\varphi_X\rangle$ értéknél lehet. Mivel $e^2 \ln \frac{|\varphi_X|^2}{\mu^2} \sim 1$ esetén a perturbációs számítás már nem működik, ezért (4.6) már nem lesz igaz, így $\langle\varphi_X\rangle$ nem lesz tetszőlegesen nagy. Renormcsoport-megfontolások alapján a logaritmus együtthatójában az effektív csatolásokat kell írni. Így a gauge-kölcsönhatás aszimptotikus szabadsága esetén (ha a^2 nem csökken túl gyorsan) a $\beta a^2 - \gamma e^2$ kifejezés előjelet vált nagy φ_X esetén, ami meggátolja, hogy φ_X tetszőlegesen nagy legyen.

Ha V stabil minimuma az $e^2 \ln \frac{\langle\varphi_X\rangle^2}{m^2} \approx 1$ egyenlőséggel jellemzett $\langle\varphi_X\rangle$ vákuumértéknél van, akkor az alacsony energiás m tömegskálához képest exponenciálisan nagy tömegskálát sikerült gyártani.

A vázolt elképzelések bemutatására vizsgáljunk egy egyszerű $SU(5)$ modellt. Ez a gauge-multiplletten kívül tartalmazza az adjungált ábrázolásban levő A, Y és a szinglett X szuperteret. Megfelelő diszkrét és globális szimmetriák esetén a legáltalánosabb szuperpotenciál:

$$W(A, X, Y) = a \cdot \text{Tr}(A^2 Y) + bX(\text{Tr} A^2 - m^2), \quad (4.7)$$

$a, b, m > 0$. A skalárpotenciál a szuperpotenciálból és a megfelelő „gauge-tagok”-ból jön (ld. (3.2)):

$$\begin{aligned} V(\varphi_A, \varphi_X, \varphi_Y) = & \sum_{i,j} \left| \frac{\partial W}{\partial A_j^i} \right|_{A=\varphi_A}^2 + \sum_{i,j} \left| \frac{\partial W}{\partial Y_j^i} \right|_{Y=\varphi_Y}^2 + \left| \frac{\partial W}{\partial X} \right|_{X=\varphi_X}^2 + \\ & + \frac{1}{4} e^2 \text{Tr}([\varphi_A, \varphi_A^\dagger] + [\varphi_Y, \varphi_Y^\dagger])^2, \end{aligned} \quad (4.8)$$

ahol e a gauge-csatolás, $+$ adjungálást jelöl. A szuperszimmetria sérül, hiszen a $\frac{\partial W}{\partial X} = 0$ és a $\frac{\partial W}{\partial Y_j^i} = 0$ egyenlet inkonzisztens. A potenciál minimuma a következő

vákuumértéknél lesz:

$$\langle \varphi_A \rangle = b \cdot m (a^2 + 30b^2)^{-1/2} \cdot D; \quad (4.9)$$

$$\langle \varphi_Y \rangle = \frac{b}{a} \cdot \langle \varphi_X \rangle \cdot D, \quad (4.10)$$

ahol D diagonális mátrix $2, 2, 2, -3, -3$ diagonális elemekkel. Látható, hogy a sér tetlen szimmetria $SU(3) \times SU(2) \times U(1)$. Fagráfszinten itt sincs meghatározva φ_X vákuumértéke. Nagy φ_X értékek esetén a lényeges egyhurokjárulékok a nehéz terek-ből jönnek. $1/|\varphi_X|^2$ rendű mennyiségeket elhanyagolva a potenciál egyhurokrendig [9]

$$V(\varphi_X) = [m^4 a^2 b^2 / (30b^2 + a^2)] \left(1 + \frac{b^2}{b^2 + a^2/30} \cdot \frac{29a^2 - 50e^2}{80\pi^2} \ln \frac{|\varphi_X|^2}{\mu^2} \right). \quad (4.11)$$

Ha $29a^2 - 50e^2$ negatív, akkor φ_X „addig nő”, amíg csak (4.11) érvényes. Ha az effektív csatolásokra teljesülnek a már említett elvárások, akkor stabil vákuumérték m -hez képest exponenciálisan nagy $\langle \varphi_X \rangle$ tartományban lesz. Ekkor a (4.10)-beli $\langle \varphi_Y \rangle \approx M_{\text{GUT}}$ vákuumérték következtében az $SU(5)$ szimmetria erősen sérül $G_S = SU(3) \times SU(2) \times U(1)$ -re. A szuperszimmetria-sértés skálája — M_{SUSY} — pedig az m tömegskálával jellemezhető, hiszen a vákuumenergia m^4 nagyságrendű. Így az $\frac{M_{\text{SUSY}}}{M_{\text{GUT}}}$ hányados exponenciálisan kicsiny volta magyarázható.

Használhatjuk-e ezt a mechanizmust természetes mérték-hierarchia generálására is? A következő példa azt sugallja, hogy igen.

A modell az előzőekben tárgyalt példa kiegészítése. Vezessük be még az 5-, illetve 5*-plett C, D és a szinglett Z chirális szuperteret. Vizsgáljuk a

$$W(A, Y; C, D; X, Z) = a \cdot \text{Tr}(A^2 Y) + b \cdot X(\text{Tr} A^2 - m^2) + c Y_i^j C^j D_i + d \cdot Z(C^i D_i - m'^2) \quad (4.12)$$

szuperpotenciállal adott elméletet. A szuperszimmetria ismét fagráfszinten sérül. Bár analitikusan a minimumhely (a vákuumérték) nem adható meg, de egy elég nagy paramétertartományban a következő szerkezetű:

$$\langle \varphi_A \rangle = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_1, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3); \quad (4.13)$$

$$\langle \varphi_C \rangle = (0, 0, 0, 0, \lambda_4); \quad (4.14)$$

$$\langle \varphi_D \rangle = \overline{\langle \varphi_C \rangle}; \quad (4.15)$$

ahol $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, m, m'$ nagyságrendű mennyiségek. φ_X, φ_Y és φ_Z vákuumértéke most sincs egyértelműen meghatározva, de $\langle \varphi_X \rangle$ -szel paraméterezhető; $\langle \varphi_Y \rangle$ pedig kommutál $\langle \varphi_A \rangle$ -vel és szimmetriacsoportjuk megegyezik. Ha az előzőekben ismertett módon $\langle \varphi_X \rangle$, és így $\langle \varphi_Y \rangle, \langle \varphi_Z \rangle$ exponenciálisan nagy m, m' -höz képest, akkor természetes hierarchiát kapunk:

$$SU(5) \rightarrow SU(3) \times U(1) \times U(1) \rightarrow SU(3) \times U(1),$$

csak éppen nem a kívánt közbülső szimmetriacsoporttal. Részletesebb analízis azt

is mutatja, hogy a φ_C , φ_D -beli gauge-dublett Higgs-bozonok kis, $\sim m, m'$ tömegűek; az $SU(5)$ -partner színtriplett bozonok pedig automatikusan nagy, $\sim \langle \varphi_X \rangle$ tömegűek.

A modell a rossz közbülső szimmetriacsoport miatt nem realiztikus. Megfelelő modell konstruálása, a nagy vákuumértékek pontos meghatározása még a jövő feladata.

IRODALOM

1. *P. Langacker*, Phys. Rep. 72C, 185, 1981.
2. *Szlachányi K.* jelen kötet.
3. *Sebestyén Á.*: Közlésre nem került.
4. *Nagy T.*: jelen kötet.
5. *Gálfi L.*: jelen kötet.
6. *E. Witten*, Nucl. Phys. B185, 513, 1981.
7. *F. Bucella, J. P. Derendinger, C. A. Savoy*, CERN-preprint 3212, 1981.
8. *S. Dimopoulos, H. Georgi*, Nucl. Phys. B193, 150, 1981.
9. *E. Witten*, Phys. Lett. 105B, 267, 1981.

KOZMOLÓGIAI KORLÁTOK A SZUPERSZIMMETRIA SÉRÜLÉSÉRE

LUKÁCS BÉLA

MTA Központi Fizikai Kutatóintézet, Budapest

Az Univerzum korai forró korszakában mód volt a ma ismert részecskék szuperszimmetria szerinti párpainak keletkezésére (ha ilyenek léteznek). A tény, hogy ezek tömegsűrűsége nem vehető észre a mai Univerzumban, bizonyos korlátokat ad a szuperszimmetria sérülésének skálaparaméterére.

1. BEVEZETÉS

Míg a szuperszimmetria elméletileg rendkívül vonzó, kísérletileg nemigen látszik kézenfekvőnek, mivel az ismert és családokba sorolt részecskék közül egyiknek sem észlelték szuperszimmetria jósolta párját. Egzaktnak szuperszimmetrikus esetben a kétféle részecske tömege azonos, így nehéz volna érteni a negatív kísérleti eredményeket. Két kézenfekvő indok adódik:

1. a szuperszimmetria a természetben nem valósul meg; vagy
2. az Univerzum fejlődésének jelen szakaszában a szuperszimmetria (spontán?) sérül.

Az első lehetőséget elfogadva az egész probléma eliminálódik, és a jelen diszkusszió-nak nincs tárgya, így most csak a második esettel foglalkozunk.

Ha a szuperszimmetria sérül, $m_B \neq m_F$ (ahol m_B és m_F tetszőleges de a szuperszimmetria összekötötte bozon és fermion tömege). Ellis adott egy alsó becslést a tömegkülönbségre [1]. A Weinberg—Salam elmélet Higgs mezőit könnyűnek becsülhetjük, 1 TeV nagyságrendű tömeggel. Tegyük fel, hogy eredetileg tömegtelenek. Akkor egzakt szuperszimmetria esetén azok is maradnak, de ha a szuperszimmetria sérül, a különböző diagrammok járulékaik nem esnek teljesen ki, marad

$$\delta m_H^2 \sim \frac{g^2}{16\pi^2} |m_B^2 - m_F^2|. \quad (1.1)$$

Mivel m_H -ra van becslésünk, (1.1)-et megfordítva kapjuk, hogy könnyű részecskék párpai valahol 100 TeV-nél várhatóak (vagy a felett, ha a szóban forgó szupermultipllett gyengén csatolódik a Weinberg—Salam Higgs mezőkhöz).

Ennél pontosabb jóslás csak a szimmetriasérülés M skálaparaméterének ismeretében tehető. Mármint M -re semmi pozitív információnk sincs. Ez esetben a végtelen sok lehetőség közül a kézenfekvőket három csoportba oszthatjuk:

- a) $M \simeq m_{Pl} = 1, 22 \cdot 10^{19}$ GeV (ez ugyanis elméletileg kitüntetett tömeg);
- b) $M \simeq 10^{15}$ GeV (mint a Nagy Egyesítésben, hasonlóan ismeretlen okból); vagy
- c) $10^3 \text{ GeV} < M < 10^{15} \text{ GeV}$ (hogyan fizikai elméletekben máig üres tartomány is kitöltődjék).

Így tehát nincs túl definit jóslat, hol kellene keresni az új részecskéket, de zömüket várhatóan 100 TeV körül vagy felett. Minthogy a gyorsítóktól jelenleg 100 GeV körüli nyugalmi tömegű részecskék várhatóak (mint azt a W és Z friss megtalálása is mutatja), úgy tűnik, egyelőre a laboratóriumi előállításukra nincs sok esély.

A helyzet azonban nem teljesen reménytelen, csak a fizikai helyett csillagászati típusú megközelítést igényel. A keresett részecskék keletkezésére rendelkezésre áll az egész Univerzum, elképzelhető, hogy a feltételek valahol, valamikor kedvezőek voltak, és a keletkezett részecskéket megpróbálhatjuk itt és most észlelni.

Jelen asztrofizikai ismereteink nem valószínűsíteneek TeV feletti tömegű részecskéket keltő folyamatokat a mai Univerzumban, de az Univerzum standard modelljében az egy részecskére jutó energia kellően korai állapotban tetszőlegesen nagy, így a produkció megtörténhetett, és a stabil részecskék máig létezhetnek.

Semmiféle csillagászati ismeretünk nem mond ellent ilyen részecskék létezésének. A megfigyelési adatokkal a barionokénál egy nagyságrenddel nagyobb tömegsűrűség még összeegyeztethető [3], a galaxishalmazok jellemző tömege pedig sugall egy 30 eV körüli, erősen kölcsön nem ható és elektromosan semleges fermion [4]. Ez lehet természetesen valamelyik neutrínó [5], de ha a neutrínók tömegtelennek bizonyulnak, kereshető még az erősen kölcsön nem ható bozonok párjai közt. Mindazonáltal (feltéve a termikus, kémiai stb. egyensúlyt), a keletkezett részecskék számára a kozmológia határozott jóslatot ad, így tudjuk az adott komponens hordozta jelenlegi össztömeget is, és ez hasonlítandó össze a tapasztalattal.

2. A LEÍRÁS MÓDJA

A jelen célhoz stílusban leginkább az illene, ha az Univerzumot valamilyen szupergravitációs modellel próbálnók leírni. Ez azonban

- a) technikailag nehéz;
- b) gyakorlatilag a jelenlegi állapothoz szükségtelen;
- c) modellfüggő; és
- d) ütközik az Általános Relativitáselmélet hagyományos felfogásával, amely szerint a gravitáció nem kölcsönhatás, hanem geometria, tehát nincs közvetítő részecskéje.

Ezért most a hagyományos relativitáselméleti megközelítést alkalmazzuk: egy 4 dimenziós téridőt, amelynek geometriáját a benne levő részecskék, ill. mezők alakítják. Ennek részletei megtalálhatók a standard irodalomban [6–9], itt most csak a számunkra közvetlenül szükséges állításokat ismételjük.

A geometriát a g_{ik} metrikus tenzor írja le. Közeli pontok távolságára közvetlenül

$$ds^2 = g_{rs}(x^i) dx^r dx^s. \quad (2.1)$$

A téridőnek geometriai szimmetriája van, ha léteznek benne a geometriai alakzatok jellegét őrző eltolások. Infinitézimális alakban

$$x^{i'} = x^i + \epsilon K^i(x^k) \quad (2.2)$$

(ami nem koordinátatranszformáció, hanem mozgás rögzített koordináta-rendszerben). A K^i mező Killing-szimmetria, ha

$$\mathcal{L}_{K^i} g_{ik} = 0 \rightarrow K_{i;k} + K_{k;i} = 0, \quad (2.3)$$

ami a Killing-egyenletet, és azt jelenti, hogy eltoláskor a geometriai alakzatok változatlanok maradnak. K^i konformis szimmetria, ha az eltolás hasonlósági transzformációt eredményez:

$$\mathcal{L}_{K^i} g_{ik} = Q g_{ik} \rightarrow K_{i;k} + K_{k;i} = Q g_{ik}, \quad (2.4)$$

ahol Q egy tetszőleges függvény.

Az eltolások csoportot alkotnak műveletenként; kommutátoruk

$$[K_A, K_B]^i = K_A^r K_{B;r}^i - K_B^r K_{A;r}^i. \quad (2.5)$$

Figyelemre méltó, hogy (2.5) jobb oldalán a műveletek elvégzésekor a Γ_{ik}^m Christoffel-szimbólumok kiesnek, tehát a

$$[K_A, K_B] = c_{ABR} K_R \quad (2.6)$$

csoportelméleti relációk a metrika ismerete nélkül kiértékelhetők; adott szimmetriacsoport-hoz tartozó Killing-vektorok a metrikától függetlenül meghatározhatóak (2.5-6)-ból, azután (2.3) (vagy (2.4)) a metrikára ad megszorítást.

A metrikának valamilyen legalább másodrendű differenciálegyenletet kell ki-elégítenie, általában az Einstein-egyenletet tételezik fel:

$$R_{ik} - \frac{1}{2} g_{ik} R + \lambda g_{ik} = \kappa T_{ik}. \quad (2.7)$$

Itt R_{ik} a g_{ik} -ból alkotott Ricci-tenzor [6], [7], [9], R a spúrja, és λ az ún. kozmológiai állandó, melyről abszolút értékére mért felső korláton kívül semmit sem tudunk. A jobb oldalon T_{ik} az anyag energiaimpulzustenzora, és κ egy a klasszikus határeset rögzítette állandó:

$$\kappa = -\frac{8\pi\gamma}{c^4}. \quad (2.8)$$

Olyan egységrendszerben, ahol $\hbar = c = 1$, $\kappa = -8\pi/m_{Pl}^2$. A kozmológiai állandó be-olvasztható T_{ik} -ba a vákuum járulékaként [10].

4 dimenziós téridőben a Killing-szimmetriák maximális száma 10, ekkor a téridő állandó görbületű; a konformis szimmetriák maximális száma 15 [7]. Az Univerzumra kézenfekvő maximális szimmetriát követelni, de 10 Killing-vektor feltételezéséből a tapasztalatnak ellentmondó Univerzum adódik [11]. Ezt teljes térbeli szimmetriára gyengítve (6 Killing-vektor, a lehetséges szimmetriacsoportok $SO(4)$, $E(3)$ vagy $SO(3,1)$) a (2.6), (2.3) egyenletekből

$$ds^2 = dt^2 - R^2(t)(dx^2 + f(x)^2(d\vartheta^2 + \sin^2\vartheta d\varphi^2)), \quad (2.9)$$

ahol

$SO(4)$	$E(3)$	$SO(3,1)$
$k = +1$	0	-1
$f(x) = \sin x$	x	$\text{sh } x$,

vagyis az Univerzum geometriáját a szimmetriacsoportot jellemző k paraméter és az időfüggő $R(t)$ skálafaktor teljesen meghatározza. Ha valaki elégedetlen a szimmetriák számának ilyen korlátozásával, feltételezhet maximális konformis szimmetriát is, ami ismét (2.9)-hez vezet.

Az adott metrika esetén az Einstein-egyenletnek két nemtriviális komponense van:

$$\begin{aligned}\kappa T_{00} &= -3(k + \dot{R}^2) - \lambda R^2 \\ \kappa T_{11} &= k + \dot{R}^2 - 2R\ddot{R} + \lambda R^2.\end{aligned}\quad (2.10)$$

Rögzítve k értékét, és integrálva ezen egyenleteket kapunk egy definit Univerzum-modellt. Ehhez természetesen meg kell adni az anyag viselkedését.

3. STANDARD MODELL

Tegyük fel, hogy az Univerzumot kitöltő anyag perfekt folyadékként viselkedik, azaz

- a) kontinuumnak tekinthető, egyetlen u^i sebességmezővel;
 - b) viselkedése tökéletesen izotróp és nyírásra érzéketlen; és
 - c) nem zajlanak benne irreverzibilis folyamatok,
- akkor a (2.10) Einstein-egyenlet alakja

$$\ddot{R} = \frac{1}{6} \kappa (\varrho + 3p) R \quad (3.1)$$

$$\dot{R}^2 = -\frac{1}{3} \kappa \varrho R^2 - k,$$

ahol ϱ az energia (vagy tömeg) sűrűsége, és p a nyomás. Egyszerű termodinamikai viselkedés esetén a független állapotváltozók az s entrópiasűrűség és az n_A részecskeszámsűrűségek (termodinamikailag független komponenseként egy), és az állapot-egyenlet alakja [12]

$$\varrho = \varrho(s, n_A) \quad (3.2)$$

továbbá, mivel p intenzív, fennáll az alábbi reláció

$$p = s\varrho_{,s} + n_A \varrho_{,n_A} - \varrho. \quad (3.3)$$

Egyes extenzíveket kicserélhetünk intenzívekre [13] és ekkor egy (3.3)-mal ekvivalens másik összefüggés adódik.

Az Einstein-egyenlet ad mérlegegyenletet s -re, de n_A -ra nem, azt más megfontolások alapján magunknak kell felírunk. Alakja

$$(n_A u^r)_{,r} = v_A, \quad (3.4)$$

ahol a v_A forrásokat a produkciós („kémiai”) folyamatok határozzák meg. Kozmológiai szimmetria esetén

$$u^i = \delta_0^i \quad (3.5)$$

és akkor a részecskemérlegek alakja

$$\dot{n}_A + 3 \frac{\dot{R}}{R} n_A = v_A \quad (3.6)$$

(3.1)-ből kiküszöbölve a második deriváltat

$$\dot{q} + 3(q+p) \frac{\dot{R}}{R} = 0 \quad (3.7)$$

és ha $v_A=0$, (3.2-7) felhasználásával

$$\dot{s} + 3s \frac{\dot{R}}{R} = 0, \quad (3.8)$$

azaz a teljes entrópia az evolúció során megmarad. Ha $v_A \neq 0$, általában van entrópiaprodukciónak, kivéve a teljes kémiai egyensúlyt [14], [15].

Az Univerzum jelenlegi állapotában a barionkomponens dominálni látszik T_{ik} -ban, és a nyomás elhanyagolható, ezért

$$q = n\varphi \left(\frac{s}{n} \right). \quad (3.9)$$

A barionmegmaradás miatt

$$\dot{v} = 0 \quad (3.10)$$

és akkor (3.6) és (3.8) integrálásával

$$n = \frac{N}{2\pi^2} \frac{1}{R^3} \quad (3.11)$$

$$s = \sigma_0 n.$$

Ezt (3.1)-be írva a második egyenlet

$$\dot{R}^2 = -k - \frac{1}{3} \kappa \frac{N}{2\pi^2} \varphi(\sigma_0) \frac{1}{R} \quad (3.12)$$

az első pedig következménnyé válik. (3.12) $k=0$ -ra analitikusan integrálható:

$$R(t) = \frac{1}{2} \left(\frac{3\kappa N \varphi_0}{\pi^2} \right)^{1/3} t^{2/3}, \quad (3.13)$$

ahol az időszámítás kezdőpontját alkalmasan választottuk meg. A megoldásban R és n $t=0$ -nál szinguláris, és ez igaz a $k \neq 0$ esetre is, a szingularitás t -ben azonos kitevőjű. Az analitikusan nem integrálható eseteket célszerű a jelenlegi állapottól visszafelé integrálni. Ehhez kell R_0 és $N\varphi_0$ (ahol $_0$ a jelenlegi állapotra utal). Utóbbi helyett (3.9) és (3.11) szerint ϱ_0 is megteszi. Ezeket valahogyan meghatározva és (3.13)-at integrálva a szingularitás és a jelen közti t_0 időközre

$$t_0 = t_0(R_0, \varrho_0). \quad (3.14)$$

A szingularitáshoz közel a sűrűség nagy, és így a $p \ll \rho$ feltevés indokolatlan. Ehelyett sugárzásdominanciát követelve

$$\rho = 3p = \frac{\pi^2}{30} NT^4, \quad (3.15)$$

ahol N feketetestsugárzásban fellépő degenerációs faktor [16]. Ezt az Einstein-egyenletbe írva kapjuk $k=0$ -ra

$$R = At^{1/2} \quad (3.16)$$

$$T = \sqrt{\frac{3\pi}{2}} \left(\frac{10}{-\kappa N} \right)^{1/4} t^{-1/2}$$

($\hbar=c=1$), ahol A egy határozatlan állandó. Ez is szinguláris $t=0$ -ban; $k \neq 0$ -ra a szingularitás jellege hasonló, mert a szingularitás közelében (3.1)-ben a k tag elhanyagolható, amit a megoldás visszahelyettesítésével verifikálhatunk. $T=m_{Pl}$, ha $t \simeq \tau_{Pl} \simeq 10^{-44}$ s.

Jelenleg az Univerzumban van feketetestsugárzás, de nincs egyensúlyban a barionokkal. Az egyensúly fennmaradásának feltétele

$$\begin{aligned} \tau_{h\bar{u}l} &> \tau_{\bar{u}lk} \\ \tau_{h\bar{u}l}^{-1} &= -\frac{\dot{T}}{T} \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$\tau_{\bar{u}lk}^{-1} = n\sigma v_{rel},$$

ahol σ egy hatáskeresztmetszet. Foton-barion keverékre $v_{rel}=c$, és n a fotonsűrűség (ami termodinamikailag értelmetlen mennyiség), $n \sim T^3$.

A megfigyeléseket jelenleg végezzük, korábbi adatok direkt megfigyelése nem lehetséges. Mérhető (az összes ismert és ismeretlen nehézséggel együtt) a H Hubble-paraméter, és a q lassulás:

$$H = \dot{R}/R \quad (3.18)$$

$$q = -R\ddot{R}/\dot{R}^2$$

(3.1)-ből kapjuk:

$$\kappa \rho_0 = -6q_0 H_0^2 \quad (3.19)$$

$$k/R_0^2 = H_0(1-2q_0),$$

azaz így az R -re vonatkozó egyenlet integrálásához szükséges R_0 és ρ_0 mérhető. Ezzel tehát az Univerzum evolúciója leírható, olyan hibával, amilyennel

- a paramétereket mérni tudjuk;
- amilyennel az energiaimpulzustenzorra tett feltevéseink igazak; és
- amilyennel az Einstein-egyenlet leírja a geometria viselkedését.

4. AZ UNIVERZUM EVOLÚCIÓJA ÉS A RÉSZECSEKEFIZIKA

Feltételezhetően (?) az Univerzum korai állapotában az anyag részecskék fekete-testsugárzásszerű keveréke, kb. töltésszimmetrikusan. A feketetestszerű eloszlás miatt minden egyes részecskefajtára $n \sim T^3$, ahol n nem a termodinamikai vagy a megmaradó részecskeszám, az utóbbi a töltésszimmetria miatt kb. 0. A hőmérséklet (3.16) szerint $1/\sqrt{t}$ -vel csökken, és amikor egy részecske nyugalmi tömege alá csökken, annak sűrűsége $T^3 e^{-m/T}$ szerint csökken tovább, és általában hamarosan kihál, kivéve, ha hamarabb lecsatolódik, ill. ha volt valamilyen kis aszimmetria a részecske és antirészecske számában.

Ha a hatáskeresztmetszet a hőmérsékletnek növekvő függvénye, előállhat egy olyan pillanat, amikor egy részecskének az összes többivel való kölcsönhatása olyan gyenge már, hogy (3.17) nem teljesülhet. Ekkor az illető részecske a többiről lecsatolódik, és a továbbiakban az Univerzumot csak gravitációsan befolyásolja. Mivel feketetestsugárzásra $\rho \sim p \sim T^4 \sim R^{-4}$, míg megmaradó részecskék nyugalmi tömegsűrűségére $\rho \sim n \sim R^{-3}$, van egy idő, ami után az Univerzum már nem sugárzásdominált, és hamarosan átmegy a jelenleg is érvényes nyomásmentes modellba. A jelen pillanattól visszafelé tudunk integrálni mindaddig, amíg ismerjük az aktuális hőmérsékletnél kisebb tömegű összes létező részecske tömegét és esetleg el nem hanyagolható kölcsönhatásait. Hogy ez milyen tömegig lehetséges, annak eldöntése a részecskefizikusok feladata. Mivel még ismeretlen 0 vagy kicsiny tömegű részecskék létezése sem kizárt (pl. neutrínók), mindenki saját ízlésének megfelelő mértékben lehet optimista vagy pesszimista.

Elhanyagolva az ismeretlen könnyű részecskéket, $t=10^{-3}$ s körül $T=m_\pi c^2$, a továbbiakban a hadronprodukciónak elhanyagolható, kezdődik a leptonkorszak, 1 s körül $T \approx (m_n - m_p)c^2$, és innentől az egyensúlyi neutronkoncentráció

$$n/p \sim e^{\frac{-\Delta m \cdot c^2/T}{T}} \quad (4.1)$$

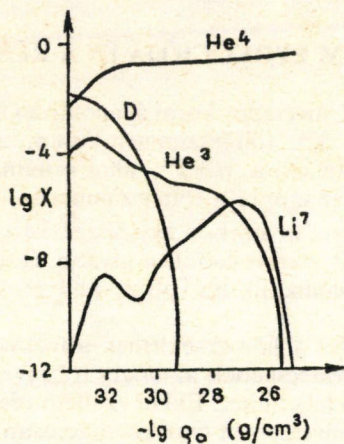
szerint esik, amíg az

$$n + l \leftrightarrow p + l' \quad (4.2)$$

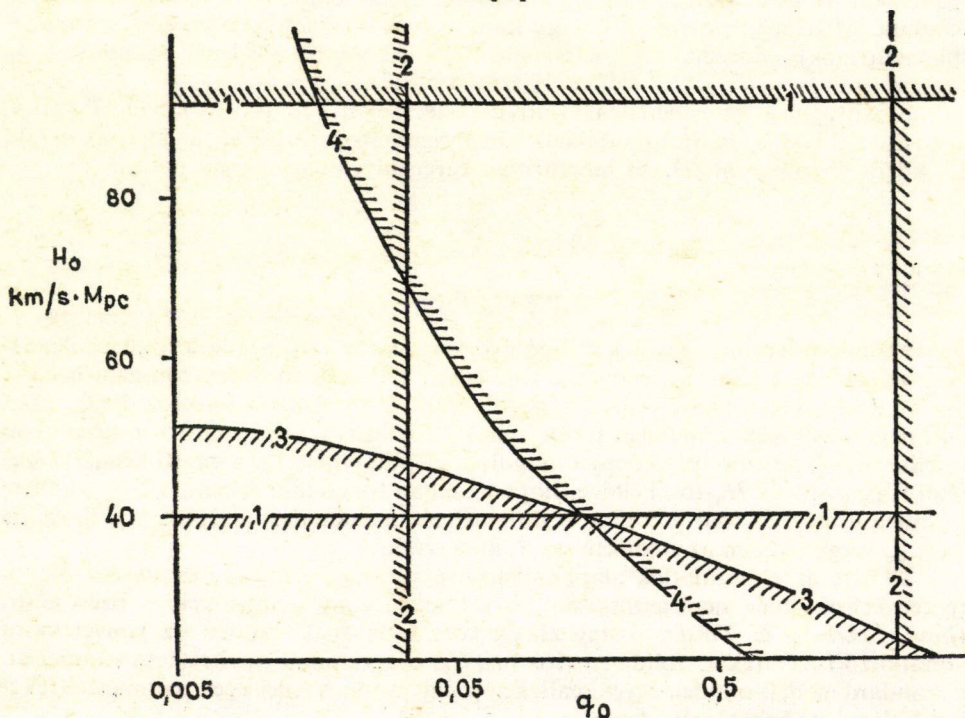
(l =valamilyen lepton) reakciók eléggé gyorsak. Mivel a gyenge kölcsönhatás hatáskeresztmetszete T^2 szerint változik, valamilyen pillanatban a neutrons szám befagy, kivéve a kb. 1000 s felezési idejű bomlást. Ha a D magokat a fotonok 1000 s után már nem tudják szétverni (tehát 1000 s-nál $T \gtrsim 0,1$ MeV), a neutronok a D magokban túlélhetnek, és később más könnyű magok is felépülhetnek. Így a végső kémiai összetétel függ q_0 -tól és H_0 -tól. Feltéve, hogy a szóban forgó időközben ($1 \text{ s} < t < 1000 \text{ s}$) a tömegsűrűségben már a barionok dominálnak, a számolást elvégezték [17], q_0 helyett q_0 függvényében az eredmény az 1. ábra szerinti.

1974-re az elmondottak alapján lehetővé vált egy szintézis, és ugyanakkor a részecskefizika még nem jelentkezt az ezt megingató eredményeivel. Ezért *Gott, Gunn, Schramm és Tinsley* összegezhette kora tudásának szintjén az Univerzumra vonatkozó ismereteket. Kétdimenziós (q_0, H_0) diagrammot szerkesztettek, amelyen a standard modell minden egyes realizációja egy pont. A lehetséges paraméterértékeket (világokat) behatárolja, hogy

1. a mérések szerint $40 \text{ km/Mpc} < H_0 < 90 \text{ km/Mpc}$;
2. ugyancsak nagy biztonsággal $0,03 < q_0 < 2$;



1. ábra. Néhány könnyű elemnek a forró Univerzumban kialakult gyakorisága különböző jelenlegi sűrűségekre vezető világmodellek esetén, Wagoner, Fowler és Hoyle szerint [17]



2. ábra. Lehetséges világmodellek Gunn, Gott, Schramm és Tinsley szerint [18]. Bővebb magyarázat és a határoló vonalak azonosítása a szövegben. A megengedett tartomány az ábra közepén üresen maradt görbevonaltú háromszög

3. $t_0 < 2 \cdot 10^{10}$ év, mert ennél idősebb égi objektumok nincsenek, (3.14) szerint $H_0 = H_0(t_0, q_0)$; és
4. a deuteronkoncentráció $\approx 2,5 \cdot 10^{-5}$ az Univerzumban, és az 1. ábrán látható, hogy ennyi deuteron nem maradhatott volna meg, ha $q_0 \sim q_0 H_0^2$ egy kritikus értéknél nagyobb lenne.

Az eredmény [18] a 2. ábrán látható, még a meglehetősen pontatlan mérések is együtt jól behatárolják a lehetséges világmodellokat.

Napjainkra részecskefizikai ismereteink annyira megszorodtak, hogy az említett szintézis iránti bizalom némileg megingott [$m \approx 30$ eV lehetségesnek látszik, és akkor a bariontömeg még ma sem dominál, ezért pl. ekkor az 1. ábrán látható eredmények nem érvényesek, de a 4. vonal eltávolítása után a (q_0, H_0) diagrammon igen nagy terület marad szabadon; a neutrínófajták száma ismeretlen stb.], de új szintézisre még képtelenek vagyunk. Ezért az előbb említett összegző munkásságra úgy tekinthetünk vissza, mint egy a korábbi idők korlátozottabb ismereteit magabiztosan tükröző történelmi emlékre (mint ahogy késői utódaik tekintettek vissza piramisépítő elődeik magabiztosságára Egyiptomban). Mivel azonban a teljes munka egyelőre magasabb szinten még nem ismételhető meg, fenntartjuk az eddigi feltevéseket ($m_\nu = 0, \lambda = 0, 2$ féle neutrínó stb.), és mindössze egyetlen fajta új részecskét tételezünk fel.

5. SZUPERSZIMMETRIA JÓSZOLTA ÚJ RÉSZESKÉK AZ UNIVERZUMBAN

Kétféle részecskével számolhatunk. A legtöbbükre *Ellis* becslése alapján [1] várható 1000 TeV-es vagy a feletti tömeg, de lehet néhány, amely speciális okokból könnyebb. A nehezekkel hamar végezhetünk, a meghatározottság kedvéért tegyük fel, hogy mindegyikük tömege $m_{sz} = 100$ TeV.

$T \gtrsim m_{sz}$ -nél nincs különbség az elektromágneses és gyenge csatolási állandó közt,

$$\sigma \approx \alpha^2/T^2 \quad (5.1)$$

és m_{sz} felett

$$n \approx T^3. \quad (5.2)$$

Így a részecske a többiekkel termikus egyensúlyban van, ha

$$t > \frac{1}{\alpha^2} \sqrt{t\tau_{Pl}} \quad (5.3)$$

amint ez (3.16-17)-ből látható, figyelembe véve, hogy $\hbar = c = 1$ esetén $m_{Pl} = 1/\tau_{Pl}$. De ez $T = m_{sz}$ táján teljesül, mert $m_{sz} \ll m_{Pl}$.

A részecske tehát $T = m_{sz}$ -nél még egyensúlyban van környezetével, akkor pedig n gyorsabban kezd csökkenni,

$$n \sim T^3 e^{-m_{sz}/T} \quad (5.4)$$

így a részecske rövidesen kihal, kivéve, ha megmaradó részecske, és volt valamilyen kezdeti részecske-antirészecske-aszimmetriája. Ez kezdeti feltétel kérdése, és feltenni önkényes volna. A nehéz részecskéknak tehát különösebb kozmológiai konzekvenciájuk nincs.

A lehetséges „könnyű” részecskékre *Ellis* [1] az alábbi lehetőségeket említi (a negatív megfigyelési eredményekből kikövetkeztetett alsó tömeghatárokkal):

\tilde{g} ; $m_{\tilde{g}} > 2 \text{ GeV}$,
 \tilde{W}^\pm ; $m_{\tilde{W}} > 15 \text{ GeV}$,
 $\tilde{\gamma}$; $m_{\tilde{\gamma}}$ lehet igen kicsiny is,
 \tilde{Z} ; $m_{\tilde{Z}}$ esetleg hasonló lehet m_W -hez,
 \tilde{q} ; $m_{\tilde{q}} > 15 \text{ GeV}$,
 \tilde{l} ; $m_{\tilde{l}} > 15 \text{ GeV}$,
 \tilde{H} ; a töltöttek tömege $> 15 \text{ GeV}$, de \tilde{H}^0 tömege igen kicsiny is lehet.

A GeV-es vagy nagyobb tömegű részecskékre az előbbi gondolatmenet módjával még mindig alkalmazható, mert $T=m$ -nél a hatáskeresztmetszetek még mindig kb. α^2/T^2 szerintiek. Marad tehát a fotínó és a semleges shiggs reménykeltő jelöltnek, valamint a szupergravitációban megjelenő gravitínó. Mivel a gravitínó tömegét a legegyszerűbb jósolni, a továbbiakban a 3 eléggé hasonló lehetőség közül azt vizsgáljuk meg, hogy gravitínók létezése esetén a jelenlegi kozmológiai ismereteink milyen korlátokat adnak a szimmetria sérülését jellemző M skálaparaméterre. A kérdést részletesen vizsgálta többek között *Ellis*, *Linde*, *Nanopoulos* és *Weinberg* [19], [20].

A gravitínó tömegére az elmélet [21] jóslata

$$m_G = \beta \frac{M^2}{m_{Pl}}, \quad (5.5)$$

ahol β egy 1 nagyságrendű, számunkra teljesen érdektelen szám.

A gravitínók egymással és másokkal is gravitációsan hatnak kölcsön. Így

$$\sigma \sim \begin{cases} T^2/m_{Pl}^4 & \text{ha } T > m_{Pl} \\ m_G^2/m_{Pl}^4 & \text{ha } T < m_{Pl}. \end{cases} \quad (5.6)$$

Mivel a sugárzásdominált Univerzum hőmérséklete (3.16) szerint teljesíti a

$$t \sim m_{Pl}/T^2 \quad (5.7)$$

körülbelüli relációt, és $\dot{T}/T \sim -1/t$, (3.17) kiértékelésekor adódik, hogy $T \gtrsim m_G$ esetére

$$\tau_{\text{hál}}/\tau_{\text{ütk}} \sim (T/m_{Pl})^4, \quad (5.8)$$

tehát a gravitínók $T \simeq m_{Pl}$ -nál csatolódnak le. Mivel teljesen valószínűtlen, hogy $M > m_{Pl}$ lenne, $m_G \lesssim m_{Pl}$, így a lecsatolódáskor még $n \sim T^3$. (Természetesen ez azt jelenti, hogy a gravitínókeltő folyamatok Planck-idő előtt történtek, és bizonyos önbizalom szükségeltetik ahhoz, hogy feltegyük akkorra a termikus egyensúlyt, de egyelőre mást nemigen tehetünk.) A lecsatolódás óta a gravitínók nem annihilálnak, tehát ha nem bomlanak,

$$nR^3 = \text{const.} \quad (5.9)$$

Mivel az entrópia megmarad, ha nincsenek irreverzibilis folyamatok (amit pl. feltehetünk),

$$sR^3 = \text{const.} \rightarrow n_G/s = \text{const.} \quad (5.10)$$

A lecsatolódás előtt fennállott termikus egyensúlyi állapotban, mivel minden T -nél könnyebb részecske feketetestszugárzásszerű, ekvipartíciós alapon

$$n_{\tilde{G}}/s \simeq 1/N, \quad (5.11)$$

ahol N a T -nél könnyebb (esetünkben tehát m_{Pl} -nál könnyebb) részecskefajták száma (ez (3.15) T szerinti deriválásával látható).

A gravitínó bomlásának még a lehetősége is modellfüggő, de ha ilyen folyamat létezik, akkor a τ felezési időre az elmélet [20] alsó korlátot ad:

$$\tau \gtrsim m_{Pl}^2/m_{\tilde{G}}^3. \quad (5.12)$$

Mármost jelenleg

$$s/n_{\text{bar}} \simeq 10^8. \quad (5.13)$$

Mivel, mint mondtunk, az Univerzum jelenlegi tömegsűrűsége 1 nagyságrenddel múlhatja felül a barionok járulékát, tehát minden olyan egyensúlyi sűrűségű könnyű stabil részecske problémát jelenthet az elméletnek, amelyre

$$m/m_{\text{bar}} > 10^{-7} \rightarrow m > 100 \text{ eV} \quad (5.14)$$

mint az a neutrínók esetében már jól ismert. E tömegkorlátot azonban gyengíteni kell (5.11)-nek megfelelően, mert $T=m_{Pl}$ -nál az energia igen sok részecskefajta közt oszthatott el. Így tehát a gravitínók léte nem ütközik a jelenlegi kozmológiai megfigyelésekkel, ha

$$m_{\tilde{G}} < 100 \text{ eV} \cdot N, \quad (5.15)$$

ahol N az m_{Pl} -nál kisebb tömegű részecskefajták száma.

A másik lehetőség, hogy a gravitínó ugyan ennél nehezebb, de bomlik. Ekkor teljesen bizonyos, hogy máig elbomlott:

$$\tau < 10^{18} \text{ s} \rightarrow m_{\tilde{G}} > 0,1 \text{ GeV} \quad (5.16)$$

az (5.12) felezési időt használva. Meglehetősen bizonyos, hogy elbomlott a D és He szintézis kezdetéig (mert a számított elemgyakoriságok általában jól egyeznek a tapasztalattal), így

$$\tau < 10 \text{ s} \rightarrow m_{\tilde{G}} > 10^4 \text{ GeV}. \quad (5.17)$$

Vagyis, feltételezve, hogy a gravitínók eredetileg termikus egyensúlyban voltak környezetükkel, és az Univerzum tágulása azóta (nagyságrendileg) adiabatikus volt, a tényből, hogy gravitínók létezésére a kozmológia eddig nem adott evidenciát, és a standard modell kielégítőnek látszik, a gravitínó tömegére az alábbi két korlát adódik:

$$m_{\tilde{G}} < 100 \text{ eV} \cdot N, \quad (5.18)$$

vagy

$$m_{\tilde{G}} > 10^4 \text{ GeV}.$$

Nem egészen nyilvánvaló, hogyan kellene becslést adni az m_{Pl} alatti nyugalmi tömegű részecske szabadsági fokok számára, mert a tartomány felső határa minden szokványos elmélet érvényességi határa (a legjobb esetben). Minimális GUT elméletekben az összes szabadsági fok száma 162 [16], úgy, hogy aki akar, ebből gondolhatja hogy pl. $N \simeq 1000$ egy konzervatív de decens becslés, és akkor (5.18) első lehetősége $m_{\tilde{G}} < 0,1 \text{ MeV}$.

Innen, (5.5) felhasználásával megkapjuk a korlátokat a szuperszimmetria sérülésének M skálaparaméterére:

$$M < 10^6 \sqrt{N} \text{ GeV } (\sim 10^7 - 10^8 \text{ GeV } ?),$$

vagy

$$M > 10^{11} \text{ GeV}.$$

(5.19)

Nyilvánvalóan ez a legtöbb, ami mondható (sőt, szigorúan véve a menet közben tett egyszerűsítő feltevések nagy száma miatt még e korlátok is kétesek), és így meg is állhatnánk. Részecskefizikai megfontolások alapján azonban Ellis és Nanopoulos az M -re adódó második korlátot túl magasnak találták [22]. Érvelésük szerint a gravitínó könnyebb kellene legyen bármely skalár bozonnál, így a Higgs bozonnál is, mely Weinberg—Salam elméletben 100 GeV—1 TeV lehet. Innen viszont $M \lesssim 10^{10}$ GeV. Mármint ez persze összeegyeztethető az (5.19) alternatíva első felével, de a másodikkal nem. Elképzelhető, hogy $M < 10^7$ GeV kellemetlen következményekhez vezetne (e sorok írója, aki nem részecskefizikus, nem ismer evidenciát $M < 10^7$ GeV ellen), mindenesetre megvizsgálták, nem lehetséges-e valahogyan összhangba jutni $M = 10^{10}$ GeV-vel, és az eredmény az volt, hogy igen, ha elejtik a tágulás adiabatikusságának feltevését.

6. GRAVITÍNÓK INFLÁCIÓS UNIVERZUMBAN

A jelenlegi gravitínósűrűség meghatározásához felhasználtuk:

- a) ekvipartíciót a lecsatolódás előtt;
- b) megmaradást a lecsatolódás óta;
- c) az entrópia megmaradását az Univerzumban; és
- d) az Univerzum jelenlegi entrópiáját.

Ezek közül $d)$ eléggé megalapozott, $a)$ -t jobb híján tettük fel, $b)$ -re vannak érvek mert láttuk, hogy az annihilációs hatáskeresztmetszet valóban kicsiny $T < m_{PI}$ esetén de $c)$ -re csak annyi okunk van, hogy nem tudunk az ellenkezőjéről. Világos, hogy ha az entrópia túlnyomó része a gravitínók lecsatolódása után keletkezett, akkor a jelenlegi entrópiából túlbecsüljük a gravitínók számát. Mindenesetre csak drasztikus entrópiatermelés segít, mert M -et megemelve a kívánt 3 nagyságrenddel, $m_{\tilde{g}}$ 6 nagyságrenddel nő, tehát $n_{\tilde{g}}$ 6 nagyságrenddel csökkentendő, és ez csak úgy lehetséges, ha az összentrópia 10^6 -szorosára nőtt a gravitínók keletkezése óta.

A probléma sok hasonlóságot mutat azzal, ami a Nagy Egyesítés kozmológiai alkalmazásánál lép fel, Ellis és Nanopoulos hasonló irányban kereste is a kiutat. Ott a spontán szimmetriasérüléskor keletkező (?) nehéz monopólusok túlzott tömegjárulékától kell megszabadulni. Mármint a spontán szimmetriasérülést tartalmazó elméletekben a Higgs bozonok önkölcsönhatása olyan, hogy magas hőmérsékleten egyetlen energiaminimum van, egy szimmetrikus állapot, ahol a Higgs bozonok várható értéke 0, míg alacsony hőmérsékleten a minimum aszimmetrikus, és általában nem is csak egy létezik [23]. De akkor lehetséges, hogy a mezők nem a legmélyebb minimumba jutnak fázisátmenetkor. Ekkor egy energiatöbblet jelentkezik, ami ugyanakkora nyomáscsökkenéssel jár [16], [23]. Ha a hőmérséklet lényegesen csökken az alatt, amíg a rendszer e „hamis vákuum”-ban marad, akkor az anyag tart egy álla-

pothoz, melyben

$$q + p = 0$$

(6.1)

$$q = -p = \Delta V \sim M^4,$$

ahol ΔV a fals és a valódi vákuum energiasűrűség-különbsége, és M ismét a szimmetriasérülés skálaparamétere. Természetesen a konkrét elméletben fellépnek valamilyen szorzófaktorok ΔV és M^4 közt. Mármost tételezzük fel, hogy az anyag a hamis vákuumban túlhűlve valóban jól megközelíti a (6.1) szerinti állapotot (amihez nyilván számos különböző feltétel teljesülése szükséges). (6.1)-et (3.1)-be helyettesítve és $k=0$ -ra szorítkozva a megoldás

$$R(t) = C e^{\sqrt{\frac{8\pi}{3}} \frac{\Delta V}{m_{Pl}^2} t} \quad (6.2)$$

és nagyságrendi becslésként a kitevő $M^2 t / m_{Pl}$. (Habár a (6.1) szerinti viselkedés egzotikus, ismert fizikai törvénynek ellent nem mond, és nem sérti az ún. energia-pozitivitási elvet sem [8].)

Maga a túlhűlés és exponenciális expanzió még adiabatikus, de értelmes feltenni, hogy a rendszer nem marad mindörökké a sekélyebb minimumban. (Egy érv lehetne, hogy most bizonyosan nincs ott, de nem nyilvánvaló, hogy korábban abba ment.) Amikor a második fázisátmenet zajlik, az egyensúlyi Gibbs-feltételek már nem tudnak teljesülni, nemegyensúlyi fázisátmenet pedig entrópiatermeléssel jár [15]. Ennek mértékét csak a fázisátmenet részletes dinamikai leírásával lehetne meghatározni, anélkül csak annyi mondható, hogy az entrópiatermelés elégséges lehet, ha a rendszer eléggé sokáig marad a sekély minimumban. Hogy ez lehetséges-e, arra vonatkozóan különböző, időnként egymásnak ellentmondó eredményű becslések léteznek [23].

Hasonló mechanizmus minden további nélkül elképzelhető, mikor a szuperszimmetria sérül spontán. Továbbá, hogy a Nagy Egyesítés szimmetriájának sérülésekor fellép egy infláció, az automatikusan felhígítja a gravitínókat is, hiszen a monopolusok felhígításához szükséges entrópiatermelés legalább cca. 10^{15} -szörös, több mint elegendő a gravitínóknál szükséges 10^6 -szoroshoz képest. Az azonban, hogy ilyen félresikerült fázisátmenet és túlhűlés elképzelhető, nem jelenti azt, hogy szükségképpen meg is történt, ahhoz számos egyéb feltételnek kellene teljesülnie (pl. hogy a túlhűlés elegendő ideig folytatódik), és e feltételek teljesülését még a Nagy Egyesítés lényegesen jobban tanulmányozott esetében sem vizsgálták meg kielégítően. Általában, az e fejezetben ismertetett gondolatmenet túl testreszabott, és világosan az a célja, hogy egy bizonyos szempontból kellemesnek tekintett paraméterértéket összhangba hozzon a megfigyelésekkel. Ezért úgy tűnik, hogy az e mechanizmus által lehetővé tett paraméterértékek, habár esetleg lehetségesek, nem maguktól értetődőek.

7. KONKLÚZIÓ

Az elmondottakat röviden a következőképpen lehet összefoglalni: A szuperszimmetria és supergravitáció által jósolt legtöbb új részecskének, nevezetesen, amelyek tömege a W és Z bozonokéval összemérhető, vagy nagyobb, nincs kozmológiai következménye, ami számunkra megfigyelhető volna, mert ezek a hőmérséklet csökkenése során még a kozmikus elemszintézis megkezdődése előtt kihaltak vagy elbom-

lottak. Kozmológiailag jelentős lehet viszont a fotinó, a semleges shiggs és a gravitínó. Ezek közül diszkutáltuk a gravitínó kozmológiai szerepét, feltételezve, hogy az Univerzum evolúciója többé-kevésbé a standard modellnek megfelelő volt. Az eredmény az, hogy a jelenlegi kozmológiai megfigyelésekkel nem jutunk ellentmondásra, ha a gravitínó elegendően könnyű (mert akkor a jelenlegi Univerzumban is jelen van, de nem észlelhető), valamint ha elegendően nehéz (mert akkor az elemszintézis kezdetéig elbomolhatott). Egy közbülső tömegtartomány azonban súlyos nehézségekre vezetne.

Mivel a gravitínó tömege közvetlenül összefügg a szuperszimmetria sérülésének skálaparaméterével, az elmondottak arra jelentenek korlátokat. Ha a szuperszimmetria létezik, akkor sérülésének skálaparamétere 10^7 GeV-nál kisebb, vagy 10^{11} GeV-nél nagyobb kell legyen ahhoz, hogy a részecskefizika és a kozmológia jóslatai természetes módon, ad hoc feltevések nélkül összhangban legyenek.

IRODALOM

1. Ellis J.: Proc. Neutrino '82, Balatonfüred, 1982.
2. Preskill J. P.: Phys. Rev. Lett. 43, 1365, 1979.
3. Faber S. M., Gallagher J. S.: Ann. Rev. Astron. Astroph. 17, 135, 1979.
4. Lukács B., Paál Gy.: Csillagászati Évkönyv 1982. Gondolat, 1982., 250. 1.
5. Szalay S.: Fizika 1975. Gondolat, 11. old.
6. Landau L. D., Lifsic E. M.: Elméleti fizika II. Klasszikus erőterek, Tankönyvkiadó, 1976.
7. Eisenhardt L. P.: Riemannian Geometry, Princeton Univ. Press, 1926.
8. Hawking S. W., Ellis G. F. R.: The Large Scale Structure of Space-Time. Cambridge Univ. Press, 1973.
9. Perjés Z.: Magy. Fiz. Foly. 24, 173, 1976.
10. Lukács B.: Acta Phys. Pol. B14, 33, 1983.
11. Robertson H. P., Noonan T. W.: Relativity and Cosmology, Saunders, 1969.
12. Ehlers J.: (a Relativity, Astrophysics and Cosmology, ed. W. Israel, D. Reidel, Dordrecht—Boston, 1972 kötetben).
13. Fényes I.: Termosztatika és termodinamika. Műszaki, 1968.
14. Biró T., Barz, H. W., Lukács B., Zimányi J.: Phys. Rev. C27, 2695, 1983.
15. Csernai L. P., Lukács B.: Phys. Lett. B132, 295, 1983.
16. Guth A.: Phys. Rev. D23, 347, 1981.
17. Wagoner R. V., Fowler W. A., Hoyle F.: Ap. J. 148, 3, 1967.
18. Gunn J. E., Gott J. R., Schramm D. N., Tinsley B. M.: Ap. J. 194, 543, 1974.
19. Ellis J., Linde A. D., Nanopoulos D. V.: CERN TH. 3356, 1982.
20. Weinberg S.: Phys. Rev. Lett. 48, 1303, 1982.
21. Deser S., Zumino B.: Phys. Rev. Lett. 38, 1433, 1977.
22. Ellis J., Nanopoulos D. V.: CERN TH. 3319, 1982.
23. Kibble T. W. B.: (a Monopoles in Quantum Field Theories, Proc. Monopole Meeting, Trieste, eds. M. S. Craigie et al., World Scientific, Singapore kötetben) 341. old.

A SZUPERTÉRIDŐ GEOMETRIÁJÁNAK ALAPJAI

SZABÓ LÁSZLÓ

ELTE Számítóközpont, Budapest

Program

A szupertéridő szokásos felfogásával kapcsolatban — vagyis, hogy bizonyos koordináták „anti-kommutáló számok” — interpretációs nehézségek merülnek fel. Milyen mérőrudak és órák mérik a szupertéridő anti-kommutáló koordinátáit? Ebben a cikkben megmutatjuk, hogy a szupergravitációhoz szükséges szupertéridő fogalma megkonstruálható a téridő felett értelmezett vektornyalábok nyelvén és ez lehetőséget ad a szupertéridő-szerkezet ún. operacionális — azaz a makroszkopikus megfigyelők által végzett invariáns mérések nyelvén történő — kifejtésére.

Gradált sokaság

1. Legyen V egy R feletti vektortér.

V külső algebrája:

$$\text{Ext } V := \bigoplus_{i=0}^m (\text{Ext } V)_i, \quad (1)$$

ahol

$$(\text{Ext } V)_0 = R,$$

$$(\text{Ext } V)_i = \underbrace{V \wedge V \wedge \dots \wedge V}_{i\text{-szer}}$$

\wedge a külső szorzást, azaz az anti-szimmetrikus tenzor-szorzást jelöli.

Legyen $\{b^M\}_{M=1\dots m}$ bázis V -ben. Ekkor nyilvánvalóan

$$\{1, b^M, b^M \wedge b^N, \dots, b^1 \wedge \dots \wedge b^m\} \quad (2)$$

bázist $\text{Ext } V$ -ben, és tetszőleges $a \in \text{Ext } V$ elem e bázis szerint kifejtendő:

$$a = r_0 + r_M b^M + \dots + r_{1\dots m} b^1 \wedge \dots \wedge b^m \quad (3)$$

$\text{Ext } V$ külső algebra páros és páratlan elemeket tartalmaz:

$$\text{Ext } V = (\text{Ext } V)^0 \oplus (\text{Ext } V)^1; \quad (4)$$

ahol

$$(\text{Ext } V)^0 = (\text{Ext } V)_0 \oplus (\text{Ext } V)_2 \oplus \dots$$

$$(\text{Ext } V)^1 = (\text{Ext } V)_1 \oplus (\text{Ext } V)_3 \oplus \dots \quad (5)$$

Nyilvánvaló, hogy

$$a \wedge b = (-1)^{o(a)o(b)} b \wedge a,$$

ahol

$$o(a) = \begin{cases} 1 & \text{ha } a \in (\text{Ext } V)^0 \\ -1 & \text{ha } a \in (\text{Ext } V)^1. \end{cases} \quad (6)$$

2. Legyen M egy n -dimenziós differenciálható sokaság. $\mathfrak{B}(M, \pi, V)$ egy M feletti vektornyaláb, melynek fibrumtípusa n -dimenziós valós vektortér. Tekintsük \mathfrak{B} külső szorzatát

$$(\text{Ext } \mathfrak{B}) := \bigcup_{x \in M} \text{Ext}(\pi^{-1}(x)),$$

és tegyük fel, hogy

$$(\text{Ext } \mathfrak{B})_0 \simeq \mathbf{R} \times M.$$

Legyen $\{\theta^M\}_{M=1 \dots m}$ bázis-szekciók egy rendszere $\Gamma(\mathfrak{B}, U)$ -ban. Ekkor tetszőleges $f \in \Gamma(\text{Ext } \mathfrak{B}, U)$ szekció θ^M -ek külső szorzatai szerint kifejtethető (a \wedge jeleket a rövidség kedvéért elhagyjuk):

$$f = f_0 + f_M \theta^M + f_{MN} \theta^M \theta^N + \dots, \quad (1)$$

ahol

$$f_0, f_M, \dots \in C^\infty(U, \mathbf{R}).$$

$A(U) := \Gamma(\text{Ext } \mathfrak{B}, U)$ az 1. pont (4)-nek megfelelően gradált kommutatív algebrát alkot. Az

$$A := \{A(U) \mid U \subseteq M \text{ nyílt}\} \quad (2)$$

kévt a *gradált függvények kévéjének* nevezzük.

(M, A) párt *gradált sokaságnak* nevezzük.

A „szuper-mezők” mibenlétének mélyebb megértése szempontjából rendkívül lényeges megjegyeznünk a következőket. (M, A) gradált sokaság nem határozza meg egyértelműen a vektornyalábot, azaz létezik $A(U)$ -nak olyan automorfizmusa, amely nem reprezentálható \mathfrak{B} nyaláb lineáris transzformációi nyelvén. Ez könnyen demonstrálható:

$$\text{Ext } V = \mathbf{R} \oplus (\text{Ext } V)_N, \quad (3)$$

ahol $(\text{Ext } V)_N$ az $(\text{Ext } V)^1$ által generált nilpotens ideált jelöli. $(\text{Ext } V)_N$ felfogható egy $\text{Ext } V$ feletti vektortérnek, melynek elemei

$$v = v_M b^M, \quad v_M \in \text{Ext } V$$

alakúak. $(\text{Ext } V)_N$ egy lineáris transzformációja:

$$v_{M'} = A_{M'}^N v_N, \quad A_{M'}^N \in \text{Ext } V.$$

Belátható, hogy $A_{M'}^N$ invertálható, ha a b^M -szerinti kifejtésben szereplő első komponense, amely rendes szám-mátrix, invertálható. Ha $A_{M'}^N$ invertálható és csak páros elemeket tartalmaz, tehát megőrzi a gradációt, akkor

$$b^{M'} = (A^{-1})_{N'}^{M'} b^N.$$

$(A^{-1})_{N'}^{M'}$ b^M -kifejtése:

$$(A^{-1})_{N'}^M = A_{0N'}^{-1M} + A_{PQ}^{-1} b^P b^Q + A_{PQRS}^{-1} b^P b^Q b^R b^S + \dots,$$

tehát

$$b^M = A_0^{-1} b^N + A_{PQ}^{-1} b^P b^Q b^N + \dots \quad (4)$$

(4) egy olyan bázis-transzformáció (Ext V)-ben, amely nem fejezhető ki V lineáris tér lineáris transzformációival. Vegyük észre azonban, hogy Ext V -nek a reális része invariáns. Mindez triviálisan megismételhető Ext \mathfrak{B} -re is. Így azt találjuk, hogy $A(U)$ algebrának több ekvivalens vektornyaláb-ábrázolása van. Ez azt jelenti, hogy a gradált függvényeknek csak a b^M -kifejtés — ami önmagában is reprezentáció függő — szerinti C^∞ -része rendelkezik jól definiált „pontbeli” értékkel. Fizikai szempontból tehát nem egyszerűen az a lényeg, hogy a b^M -kifejtésbeni magasabb komponensek spines mezőket írnak le, és ennek megfelelően transzformálódnak, hanem ezek a mezők a (4) típusú transzformációk során összekeverednek. Így a fizikai mezők komponenseit úgy kell elképzelni, mint amik az egész b^M -kifejtésben vannak elkenve.

Bevezetjük a \sim leképezést, amely egy gradált függvényhez annak C^∞ -részét rendeli.

3. (M, A) gradált differenciálható sokaság *tangenstere* a $p \in M$ pontban az a gradált vektortér, amely az olyan

$$W_p: \Gamma(\text{Ext } \mathfrak{B}) \rightarrow \text{Ext } V$$

típusú lineáris leképezéseket tartalmazza, melyekre teljesül a következő:

$$W_p(fg) = W_p(f)g(p) + (-1)^{\sigma(w)\sigma(f)}f(p)W_p(g).$$

Két gradált vektortér közötti lineáris leképezések gradált vektorteret alkotnak. Páros az a lineáris leképezés, amely megőrzi a gradálást, páratlan az, amelyik a páros alteret a páratlanba képezi.

4. Legyen x_μ lokális koordináta $U \in p$ koordinátakörnyezetben, θ^M pedig bázis V -ben.

Megmutatható [1], hogy tetszőleges $w \in T_p$ tangensvektor előállítható a következő alakban:

$$W = W^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} + W^A \frac{\partial}{\partial \theta^A},$$

ahol $w^\mu, w^A \in \text{Ext } V$, $\frac{\partial}{\partial \theta^A}$ parciális derivált operátorok pedig az alábbi módon vannak definiálva:

$$\frac{\partial}{\partial \theta^A} \theta^B = \delta_A^B$$

$$\frac{\partial x^\mu}{\partial \theta^A} = \frac{\partial \theta^A}{\partial x^\mu} = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta^A} \frac{\partial}{\partial \theta^B} + \frac{\partial}{\partial \theta^B} \frac{\partial}{\partial \theta^A} = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta^A} \frac{\partial}{\partial x_\eta} - \frac{\partial}{\partial x_\mu} \frac{\partial}{\partial \theta^A} = 0.$$

5. (M, A) gradált sokaság *kotangenstere* $p \in M$ pontban a következő gradált lineáris tér:

$$T_p^* = \{\omega_p: T_p \rightarrow \text{Ext } V | \text{lineáris}\}.$$

A kotangens nyaláb:

$$T^*M = \bigcup_{p \in M} T_p^*.$$

A kotangens nyaláb szekciói az 1-forma-mezők. A külső deriválást függvényekre a következőképpen értelmezzük:

$$d: A(U) \rightarrow \Gamma(T^*M)$$

$$(df)(V) = V(f).$$

A szokásos módon definiáljuk a duális naturális bázist:

$$dx^\mu(\partial_\nu) := \delta_\nu^\mu$$

$$d\theta^M(\partial_N) := \delta_N^M$$

$$d\theta^M(\partial_\mu) = dx^\mu(\partial_M) := 0.$$

Egy tetszőleges ω 1-forma ebben a bázisban:

$$\omega = \omega_\mu dx^\mu + \omega_M d\theta^M,$$

ahol

$$\omega_\mu, \omega_M \in A(U).$$

Definiáljuk a (p, m) -típusú formákat:

$$A^{p,m}(M) := \{\omega | \omega = \omega_{\mu_1 \dots \mu_p M_1 \dots M_m} dx^{\mu_1} \wedge \dots \wedge dx^{\mu_p} \wedge d\theta^{M_1} \wedge \dots \wedge d\theta^{M_m}\},$$

ahol

$$dx^\mu \wedge dx^\nu = -dx^\nu \wedge dx^\mu$$

$$dx^\mu \wedge d\theta^M = -d\theta^M \wedge dx^\mu$$

$$d\theta^M \wedge d\theta^N = d\theta^N \wedge d\theta^M.$$

Ezek után a külső deriválást az alábbi módon terjeszthetjük ki:

$$d: A^{l,m}(M) \rightarrow A^{l+1,m}(M) \oplus A^{l,m+1}(M).$$

$$d\omega = \frac{\partial \omega_{\mu_1 \dots \mu_l N_1 \dots N_m}}{\partial x^\lambda} dx^\lambda \wedge dx^{\mu_1} \wedge \dots \wedge d\theta^{N_m} + \frac{\partial \omega_{\mu_1 \dots \mu_l N_m}}{\partial \theta^p} d\theta^p \wedge dx^{\mu_1} \wedge \dots \wedge d\theta^{N_m}.$$

Szupersokaság

6. Legyen W egy megszámlálhatóan végtelen dimenziós lineáris tér. Ext W külső algebrát ugyanúgy értelmezhetjük, mint az előbbi, véges dimenziós esetben, azzal a különbséggel, hogy csak véges külső szorzatokat tartalmaz. Ext W páros és páratlan elemeket tartalmaz:

$$\text{Ext } W = (\text{Ext } W)^0 \oplus (\text{Ext } W)^1.$$

Legyen b^M bázis V -ben. Definiáljuk a következő kommutatív algebrát:

$$\text{Sup } V := \bigoplus_{i=0}^m (\text{Sup } V)_i,$$

ahol

$$(\text{Sup } V)_0 = (\text{Ext } W)^0$$

és

$$(\text{Sup } V)_{i \neq 0} := \{W_{M_1 \dots M_i} b^{M_1} \wedge \dots \wedge b^{M_i}\},$$

ahol

$$W_{M_1 \dots M_i} \in \begin{cases} (\text{Ext } W)^0 & \text{ha } i \text{ páros} \\ (\text{Ext } W)^1 & \text{ha } i \text{ páratlan.} \end{cases}$$

Két elem szorzata:

$$\begin{aligned} (W_{M_1 \dots M_i} b^{M_1} \wedge \dots \wedge b^{M_i})(Z_{N_1 \dots N_j} b^{N_1} \wedge \dots \wedge b^{N_j}) = \\ = (W_{M_1 \dots M_i} Z_{N_1 \dots N_j}) b^{M_1} \wedge \dots \wedge b^{M_i} \wedge b^{N_1} \wedge \dots \wedge b^{N_j}, \end{aligned}$$

amely szorzás művelet valóban kommutatív.

7. Defináljuk a következő globális szorzatnyalábot:

$$\text{Ext } \mathfrak{B} = M \times \text{Ext } W.$$

E nyaláb C^∞ -szekciói gradált algebrát alkotnak:

$$\Gamma(\text{Ext } \mathfrak{B}) = \Gamma(\text{Ext } \mathfrak{B})^0 \oplus \Gamma(\text{Ext } \mathfrak{B})^1.$$

\mathfrak{B} ún. *szupernyalábja* definíció szerint egy olyan M felett értelmezett nyaláb, melynek fibrumtípusa $\text{Sup } V$:

$$\text{Sup } \mathfrak{B}(M, \text{Sup } V).$$

Legyenek θ^M -ek bázisszekciók $\Gamma(\mathfrak{B}, U)$ -ban. Tetszőleges $\Phi \in \Gamma(\text{Sup } \mathfrak{B})$ szekció lokálisan kifejezhető az alábbi módon:

$$\Phi = \Phi^0 + \Phi_M^1 \theta^M + \Phi_{MN}^2 \theta^M \wedge \theta^N + \dots,$$

ahol

$$\Phi^i \in \begin{cases} \Gamma(\text{Ext } \mathfrak{B})^0 & \text{ha } i \text{ páros} \\ \Gamma(\text{Ext } \mathfrak{B})^1 & \text{ha } i \text{ páratlan.} \end{cases}$$

Így tehát minden $U \subseteq M$ nyílt halmazhoz létezik

$$S(U) := \Gamma(\text{Sup } \mathfrak{B}, U)$$

kommutatív algebra.

$$S := \{S(U) \mid U \subseteq M \text{ nyílt}\}$$

rendszer, a szokásos leszűkítés-operációval kéve struktúrát alkot: *skalár szupermezők kénéje*. (M, S) párt *szupersokaságnak* nevezzük.

8. Az (M, S) szupersokaság *tangenstere* a $p \in M$ pontban az összes

$$W_p: \Gamma(\text{Sup } \mathfrak{B}) \rightarrow \text{Sup } V$$

lineáris leképezés, amely teljesíti a következő nem-gradált Leibnitz-szabályt:

$$\begin{aligned} W_p(FG) &= W_p(F)G(p) + F(p)W_p(G) \\ &\quad \forall F, G \in \Gamma(\text{Sup } \mathfrak{B}). \end{aligned}$$

Megmutatható, hogy tetszőleges tangens-vektor mezőre:

$$W = W^\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} + W^M \frac{\partial}{\partial \theta^M},$$

ahol W^μ skalár szupermező és W^M ún. páratlan szupermező, vagyis olyan, hogy

$$W^M = \Phi^0 + \Phi_N^1 \theta^N + \Phi_{NR}^2 \theta^N \wedge \theta^R + \dots$$

és

$$\Phi^i \in \begin{cases} \Gamma(\text{Ext } \mathfrak{B})^1 & \text{ha } i \text{ páros} \\ \Gamma(\text{Ext } \mathfrak{B})^0 & \text{ha } i \text{ páratlan.} \end{cases}$$

Legyen W és V két tangensvektormező. A kommutátorok:

$$[V, W](\Phi) = V(W(\Phi)) - W(V(\Phi)).$$

Szupertér-idő

9. Ebben a fejezetben két egyszerűsítést teszünk. Egyrészt mindent a továbbiakban gradált sokaságokon tárgyalunk. Ez indokolt lehet mindaddig, amíg a klasszikus fizika keretei között mozgunk. Másrészt, hogy a téridőt három dimenziósnek tételezzük fel. Mindkét egyszerűsítés csak technikai jellegű, a lényeget nem érinti.

A közönséges relativitáselméletben egy lokális megfigyelő által végzett mérések legvilágosabban a lokális keret segítségével írhatók le. A lokális keret matematikailag modellezi a megfigyelő óráit és mérőrudait. A szupergravitációban feltesszük, hogy a megfigyelőnek Stern—Gerlach-mágnesei is vannak, melyekkel mérni tudja a spinor-mezők orientációját. Ezeket a mérő eszközöket a gradált sokaság spinoriális lokális kereteivel modellezzük.

10. A szupergravitációban a téridő egy (M, A) gradált sokaság. M 3-dimenziós differenciálható sokaság ellátva egy $(2,1)$ -szignatúrájú metrikával. V vektortér 2-dimenziós, elemei $0(2,1)$ csoport spinor-ábrázolásai szerint transzformálódnak. A 2. pontban bevezetett vektornyaláb:

$$\mathfrak{B}(M, V, 0(2, 1)).$$

Ennek tetszőleges szekciója

$$f = f_M \theta^M, \quad M = 1, 2,$$

ahol $f_M \in C^\infty(M, R)$, θ^M pedig bázis mező. Legyen C^{MN} egy antiszimmetrikus metrika: \mathfrak{B} nyalábon:

$$C^{MN} = -C^{NM}.$$

Vezessük be az alábbi jelöléseket:

$$f^M := C^{MN} f_N$$

$$\bar{\theta}\theta := C^{MN} \theta_M \theta_N.$$

Ekkor tetszőleges $f \in \Gamma(\text{Ext } \mathfrak{B})$ szekcióra

$$f = f^0 + f_M \theta^M + f^2 \bar{\theta}\theta.$$

11. A következőkben azt tárgyaljuk, hogyan kapcsolhatók a gradált sokaságon értelmezett geometriai objektumok a lokális megfigyelő méréseihez.

A szupergravitáció alapvető konvenciója a következő: *minden fizikailag megfigyelhető mennyiség egy gradált függvény C^∞ -részével van reprezentálva.*

Vezessük be az E_a vektor keretmezőket, melyek a lokális $O(2,1)$ transzformációkkal szemben vektoriálisan, és az E_A spinor keretmezőket, melyek spinoriálisan transzformálódnak. Ezek mind gradált vektormezők:

$$E_a = E_a^\mu \partial_\mu + E_a^M \partial_M$$

$$E_A = E_A^\mu \partial_\mu + E_A^M \partial_M,$$

ahol az együttthatók gradált függvények. Egy f gradált függvény fizikailag a következő tereket írja le:

1. f skalármező, melynek megfigyelhető értéke \tilde{f} .
2. $X_A = E_A(f)$ spinormező, melynek megfigyelhető értéke \tilde{X}_A .
3. $F = E^A(E_A(f))$ segédmező, melynek megfigyelhető értéke \tilde{F} .

Szuperszimmetria transzformációk

12. A szupertér-idő infinitezimális transzformációit a gradált sokaságon értelmezett Lie-deriválással írhatjuk le. Legyen

$$\lambda = \lambda^\mu \partial_\mu + \lambda^M \partial_M$$

egy tetszőleges gradált vektormező (M, A) -n.

A λ -vektormező szerinti Lie-deriválást az alábbi összefüggésekkel definiáljuk:

$$L_\lambda(f) := \lambda(f)$$

$$L_\lambda(E_a) := [\lambda, E_a]$$

$$L_\lambda(E_A) := [\lambda, E_A].$$

Egy λ gradált vektormezőnek csak a

$$\tilde{\lambda} = \varepsilon^M \partial_M + l^\mu \partial_\mu$$

$$\varepsilon^M, l^\mu \in C^\infty(M, \mathbf{R})$$

része van hatással a terek fizikailag megfigyelhető részére, ez tehát az aktív transzformáció, míg a λ magasabb komponensei szerinti Lie-deriválások passzív transzformációk.

Közeli lokális mérések összehasonlítása

13. Végül a közönséges gravitációelmélet gondolatmenetét követve szükségünk van a $H(M, 0(2,1))$ principális nyáláb egy konnektiójára, amely lehetőséget nyújt a különböző téridő pontokban végzett megfigyelések eredményeinek összehasonlítására.

Definiáljuk a *dúális keretmezőt* a következőképpen:

$$E^a(E_b) = \delta_b^a$$

$$E^A(E_B) = \delta_B^A$$

$$E^A(E_a) = E^a(E_A) = 0,$$

azaz

$$E^a = E_\mu^a dx^\mu + E_A^a d\theta^A$$

$$E^B = E_\mu^B dx^\mu + E_A^B d\theta^A,$$

$$E_\mu^a E_b^\mu + E_M^a E_b^M = \delta_b^a$$

$$E_\mu^A E_B^\mu + E_M^A E_B^M = \delta_B^A$$

$$E_\mu^a E_B^\mu + E_M^a E_B^M = E_\mu^A E_b^\mu + E_M^A E_b^M = 0.$$

A vektor, illetve spinor keretmezők a $H(M, 0(2,1))$ principális nyalábhoz a vektor-, illetve spinor-ábrázolással asszociált vektornyalábok szekciói.

Az infinitezimális forgatások:

$$\delta E_b = \lambda_b^a E_a$$

$$\delta E_A = \frac{1}{2} \varepsilon_{abc} \lambda^{ab} [\sigma^c]_A^B E_B,$$

ahol $[\sigma^c]_A^B$ a c -edik Pauli-mátrixot jelöli.

Jelölje ω_b^a a $H(M, 0(2,1))$ principális nyaláb konnektió 1-formáit.

Ekkor a

$$\nabla_U(f) = U(f) \quad U \in \Gamma(T)$$

$$\nabla_U E^a = \omega(U)_b^a E^b \quad f \in A(M)$$

$$\nabla_U E^A = \frac{1}{2} \omega(U)_b^a \varepsilon_b^{ac} [\sigma^c]_A^B E^B$$

$$\nabla_U E_a = -\omega(U)_a^b E_b$$

$$\nabla_U E_A = -\frac{1}{2} \omega(U)_a^b \varepsilon_{bc}^a [\sigma^c]_A^B E_B,$$

a C^∞ esettel analóg formulák, ahol U gradált vektormező és f gradált függvény, egy *konnektiót* definiál a szupertéridőn:

IRODALOM

1. B. Kostant, "Graded Manifolds, Graded Lie Theory and Prequantization" in Differential Geometric Methods in Mathematical Physics. Springer, Lecture Notes in Math. vol. 570, 1977.
2. L. Smolin, "Superspace Unmasked: The Physical Interpretation of Supergravity Theory" HUTP—78/AO43.
3. J. Dell, J. Smolin, "Graded Manifold Theory as the Geometry of Supersymmetry" Commun. Math. Phys. 66. 197—221, 1979.

AZ IUPAP HÍREI

A FIZIKUSOK NEMZETKÖZI SZERVEZETE, AZ IUPAP*

KISS DEZSŐ

MTA Központi Fizikai Kutatóintézet, Budapest

A tudomány nemzetközi. A világ valamennyi fizikusának közös szervezete az IUPAP, amely az International Union of Pure and Applied Physics angol elnevezésnek a rövidítése. Az IUPAP nemzetközi, de nem kormányközi szervezet, társadalmi jellegű, sok vonatkozásban hasonlít az Európai Fizikai Társulathoz, de annál szélesebb, mivel nem csak Európára terjed ki. A kapcsolat egyébként az IUPAP és az Európai Fizikai Társulat, valamint az egyéb regionális társulatok (mint pl. az Amerikai Fizikai Társulat, az Ázsiai Fizikai Társulat) között meglehetősen szoros. Bonyos átfedések is adódnak.

Az IUPAP legfelsőbb vezető szerve a Végrehajtó Bizottság (Executive Council), amelynek vezetője az elnök (President). Érdekes (és logikus) módon az elnök mellett tagja a Végrehajtó Bizottságnak a volt elnök és a leendő elnök, az ún. első alelnök (akit természetesen még a későbbi választások fognak véglegesen megerősíteni elnöki tisztében). Ily módon biztosítva van a folytonosság és a folyamatosság. A Végrehajtó Bizottságban ezenkívül részt vesznek még az alelnökök (Vice-president), akiknek a száma nyolc. Alapvető szerepet játszik az operatív munkában a főtitkár (Secretary-General). Őt segíti a főtitkárhelyettes (Associated-Secretary-General). A Végrehajtó Bizottság jelenlegi összetételét az I. Táblázatban láthatjuk.

I. TÁBLÁZAT

VÉGREHAJTÓ BIZOTTSÁG (1987-ig)

Elnök:	Prof. D. A. BROMLEY	USA.
Ex-elnök:	Prof. K. SIEGBAHN	Svédország
Első alelnök:	Prof. L. KERWIN	Kanada
Alelnökök:	Prof. P. R. AIGRAIN	Franciaország
	Prof. M. MATYAS	Csehszlovákia
	Prof. G. G. K. MENON	India
	Prof. P. C. HEMMER	Norvégia
	Prof. V. I. GOLDANSZKIJ	Szovjetunió
	Prof. R. KUBO	Japán
	Prof. T. MAYER-KUCKUK	NSZK
	Prof. D. WILKINSON	Anglia
Főtitkár:	Prof. J. S. NILSSON	Svédország
Főtitkárhelyettes:	Prof. J. KLAUDER	USA.

Az IUPAP-nak 19+2 bizottsága van. (II. Táblázat.)

Érkezett 1985. március 21.

II. TÁBLÁZAT

BIZOTTSÁGOK

1. Pénzügyi
2. Szimbólumok, egységek, nomenklatúra és fundamentális konstansok
3. Termodinamika, statisztikus mechanika
4. Kozmikus sugárzás
5. Alacsony hőmérsékletek fizikája
6. Publikációk
7. Akusztika
8. Félvezetők
9. Mágnesség
10. Kondenzált anyagok szerkezete és dinamikája
11. Részecskék és terek
12. Magfizika
13. Fizika a fejlődésért
14. A fizika oktatása
15. Atom- és molekula-fizika és spektroszkópia
16. Plazmafizika
17. Kvantumelektronika
18. Matematikai fizika
19. Asztrofizika
- A. C. — 1. Optika
- A. C. — 2. Általános relativitáselmélet és gravitáció

A 19. bizottság létrejöttéről az 1984. évi trieszti közgyűlés határozott. Emellett van még két különleges bizottság, amelyeket A. C.-vel jelöltünk (Associated Committee). Az A. C. bizottságoknak nem sikerült önálló unióként bejutnia az ICSU-ba; az ICSU tagállamai féltékenyen őrzik pozíciójukat. Hogy mégis „levegőhöz jussanak”, az ilyen nagy egyesületek csatlakoznak valamilyen meglevő unióba, így pl. az IUPAP-ba. Ezek nem összekötő bizottságok, hanem önálló „hatalmasságok”. Mint a fenti felsorolásból látható, az IUPAP bizottságai alakulásuk idején igyekeztek lefedni a fizika valamennyi fontos területét. (A bizottsági felosztás ma már nem felel meg teljesen a kor követelményeinek.) A tisztán szakmai jellegű bizottságok mellett van néhány általános feladatú és célú bizottság is, mint pl. a pénzügyi vagy mint a szimbólumokkal, egységekkel nomenklatúrával és fundamentális konstansokkal foglalkozó bizottság, a publikációs bizottság, az oktatási bizottság és a „Fizika a fejlődésért” bizottság. Ez utóbbi bizottság feladata nem triviális: történelmileg alakul. Kezdetben két álláspont állt egymással szemben, az egyik szerint a bizottság feladata, hogy kiépítse és erősítse a kapcsolatokat a fizikai alap- és alkalmazott kutatások, valamint az ipar és általában a gazdasági élet között. A másik szerint a bizottság feladata a fizika fejlődésének elősegítése a fejlődő országokban. Végül soron a kérdés úgy dőlt el, hogy inkább a másik megfogalmazáshoz áll közelebb a bizottság azzal az ésszerű kitételrel, hogy figyelembe véve a fejlődő országok igényeit, a fizikának a gazdasági élet szempontjából fontos ágainak a fejlődését szorgalmazza. Még így is azt lehet mondani, hogy a feladat nem teljesen körülhatárolt és mindenestre meglehetősen bonyolultnak tűnik. E bizottság feladata egyébként több más bizottság (pl. az oktatási, publikációs) feladatához is kapcsolódik.

Az IUPAP-nak ezen szakmai jellegű nemzetközi szervezeti felépítése mellett van még egy országok szerinti nemzeti tagozódása is. Valamennyi országban, mely tagja az IUPAP-nak, működik egy Nemzeti Bizottság, amelynek az elnöke és titkára tagja az IUPAP közgyűlésének. A Nemzeti Bizottság elnevezést néhány évvel ezelőtt

politikai-taktikai okokból *Liaison Bizottságra* változtatták, mely mögött az rejlik, hogy az IUPAP kívánatosnak tartotta a Kínai Népi Demokratikus Köztársaságot tagjai sorába bevonni, ekkor azonban felmerült ez a politikailag rendkívül kényes kérdés, hogy ki képviseli a kínai nemzetet, a Kínai Népköztársaság vagy a tajvani Kína. E kérdés megkerülésére jött létre a liaison elnevezés. Hosszú diplomáciai előkészítés után az 1984-es trieszti konferencián olyan határozat született, hogy mind a két Kína képviselői tagjai az IUPAP-nak és mind a két Kínának megvan a maga Liaison Bizottsága. Országonként változik, hogy a Liaison Bizottság egy külön szeparált bizottság-e vagy ezt a funkciót egy már meglévő bizottságra ruházták át. Ez utóbbi helyzet áll fenn Magyarországon, ahol a Magyar Tudományos Akadémia Fizikai Bizottsága egyben az IUPAP Magyar Liaison Bizottsága, és elnöke és egyik titkára hivatalból elnöke és titkára az IUPAP Magyar Liaison Bizottságnak.

Az IUPAP háromévenként tart közgyűlést, ahol egy-egy kiemelkedően fontos tudományos előadás (pl. az 1984-es trieszti közgyűlésen többek között A. Salamnak az elektromágneses és a gyenge kölcsönhatás egyesítésének elméletéről szóló előadása) mellett meghallgatja a Végrehajtó Bizottságnak, továbbá egyes bizottságainak a beszámolóját. Ezek után kerül sor a Végrehajtó Bizottság és az egyes bizottságok vezetőinek és tagjainak újraválasztására. Általános elv, hogy az elnöki funkciót csak egy perióduson, három éven át lehet betölteni. A főtitkár hosszabb időn át tevékenykedhet. Ez is biztosítja a folyamatosságot. A bizottságok elnökét, titkárát és tagjait illetően általános szabály, hogy maximum két periódusra, azaz összesen hat évre lehet őket megválasztani. Ez a megoldás biztosítja egyrészt a folyamatosságot, ugyanakkor gondoskodik az állandó felfrissülésről, cseréről, s megakadályozza a megmerevedést, bizonyos funkcióknak a kisajátítását. Az egyes országoknak a bizottságokban való képviselete nemcsak az illető országnak a fizikában elfoglalt súlyától függ. Pl. azt a kérdést, hogy hány bizottságban lehetnek Magyarországnak képviselői és melyekben, a szakmai érdemeken túlmenően általános politikai (és gyakran) személyi relációk is erőteljesen befolyásolják. Még inkább politikai kérdés a Végrehajtó Bizottságban való részvétel. A különböző bizottságokban rendszeresen vesznek részt magyar képviselők; jelenleg három magyar tagja van az IUPAP bizottságoknak. A III. táblázatban visszamenőleg felsoroljuk, hogy magyar kollegáink közül ki, mikor és melyik bizottságnak volt a tagja.

Az IUPAP egyik fontos feladata a fizikai kutatások koordinálása nemzetközi szinten, továbbá az információcsere biztosítása. Egyik legfőbb teendője a megfelelő *konferenciák szervezése* vagy szervezésének erkölcsi, ill. erkölcsi és anyagi támogatása. Meg kell jegyezni, hogy az IUPAP erkölcsi támogatása (sponsor) nemzetközileg igen magasra értékelt, mert a nyugati intézetek (és vállalatok) fizikusainak konferencia részvételi költségeit nagyobb valószínűséggel fizetik abban az esetben, ha az illető konferenciát az IUPAP támogatja. Nehézséget okoz, hogy az IUPAP-nak kis összeg áll rendelkezésére, amellyel csak néhány kiemelt konferenciát támogathat. (Az IUPAP éves átlagban nagyságrendben 100 ezer dollárt kap a nemzeti bizottságoktól, és kb. 11 ezer dollárt az UNESCO-tól.) Tudományos konferenciák támogatására az utóbbi években egyre növekvő összegeket, 1983-ban mintegy 100 ezer dollárt szánt; a szervezési jellegű és adminisztrációs találkozók és költségek mintegy 10 ezer dollárt tesznek ki évente. A fenti összegek természetesen csak durva nagyságrendi tájékoztatást nyújtanak az IUPAP pénzügyi helyzetéről. Az IUPAP által támogatott konferenciákra vonatkozóan meglehetősen pontosan kidolgozott elvek és szabályok érvényesek. Először is kategorizálta a nemzetközi rendezvényeket,

III. TÁBLÁZAT

Magyar bizottsági tagok, ill. tisztségviselők

Kovács István (BME)	1963—66 1966—75 1975—	Comission on Spectroscopy C. on Atomic and Molecular Physics and Spectroscopy IUPAP delegatus az ICSU Spectroscopy Comittee-ben
Tarnóczy Tamás	1963—72	C. on Acoustics
Fenyves Ervin	1963—69	C. on High Energy Nuclear Physics
Pál Lénárd	1966—69 1969—75 1972—75 1972—78	C. on Physics Education Executive Council, Vice-president Financial Commission C. on Magnetism
Somogyi Antal	1969—72 1972—75 1975—78	C. on Cosmic Rays titkár Cosmic Rays elnök Cosmic Rays
Szalay Sándor	1969—72	C. on Nuclear Physics
Nagy Elemér (MFKI)	1969—75	C. on Physics Education
Szépbalusy Péter	1972—78	C. on Thermodynamics and Statistical Mechanics
Szigeti György	1966—72 1972—75 1975—78	C. on Solid State Physics titkár Solid State Physics elnök Solid State Physics
Marx György	1975—81	C. on Physics Education
Krén Emil	1978—84	C. on Magnetism
Nagy Károly	1975—81 1981—87	C. for Symbols, Units, Nomenclature C. on Physics Education
Zavadowski Alfréd	1978—81	C. on Solid State Physics
Csikai Gyula	1981—84	C. on Nuclear Physics
Kiss Dezső	1981—84 1984—87	C. on Physics for Development titkár Physics for Development
Kóta József	1984—87	C. on Cosmic Rays

három csoportot különböztetve meg:

1. Általános Konferencia (General Conference)

Ez általános áttekintést ad a fizikának egy nagyobb területéről (nem gyakrabban, mint háromévenként egy-egy területről); a résztvevők száma 750 és 2000 között mozog.

2. Helyi (Szak) Konferencia (Topical Conference)

Valamelyik bizottság által lefedett területnek egy alterülete lehet, pl. a Magfizikai Bizottság esetében magspektroszkópia, magreakció, mechanizmus, nehézion fizika stb. Ezt lehet évenként rendezni, a résztvevők száma 300—600 körül mozoghat.

3. Speciális Konferencia (Special Conference)

Ezek valamilyen speciális területet kell, hogy felöleljenek, pl. a Magfizikai Bizottság esetében szögkorreláció mérések, élettartam mérések, neutron-rezonancia vizsgálatok. A résztvevők száma: 50—200 között változik.

Az IUPAP évenként 20—25 nemzetközi konferenciát támogat, ezek többségét azonban csak erkölcsileg — ami érthető a rendelkezésre álló kis összeg miatt. Ha valaki konferenciát szervez és szeretné megszerezni az IUPAP erkölcsi és anyagi támogatását, akkor a megfelelő IUPAP bizottsággal kell felvennie a kapcsolatot,

mégpedig *a konferencia időpontját megelőző év áprilisáig*. Ahhoz, hogy az IUPAP támogasson valamilyen nemzetközi rendezvényt, a formális szabályok betartásán kívül nagy súlyt helyez arra, hogy tudományosan fontos területről legyen szó, hogy a meghívott előadók és a beküldött cikkek magas színvonalat képviseljenek, valamint, hogy egy olyan referáló rendszer működjön az egyes előadások elfogadásánál, amely színvonalában megfelel valamilyen magasszintű nemzetközi folyóirat referáló bizottságának. Az IUPAP szigorúan előírja, hogy a konferencia részvételi díj (fee) nem haladhatja meg a 200 \$-t (1985-ben), amibe a Proceedings árát is be kell kalkulálni. Hogy a fejlődő országok fizikusainak a részvételét megkönnyítsék, úgy kell megállapítani a konferencia részvételi díját, hogy a bankettek és kirándulások költségei külön szerepeljenek, opciós alapon. A konferencia szervezőjének garantálnia kell, hogy a megfelelő anyagi eszközök rendelkezésre állnak. Az IUPAP általában nem támogat nyári iskolákat és regionális konferenciákat.

Az IUPAP nagy hangsúlyt helyez a tudósok szabad mozgásának a kérdésére, ezért csak olyan konferenciát hajlandó támogatni, ahol előzetesen a szervezők garantálják, hogy vízumproblémák nem lépnek fel valakinek a nemzeti hovatartozása miatt. Az esetben, ha a vízumkérelmet legalább 3 hónappal a konferenciát megelőzően adták be és a konferencia előtt két héttel még nem állt rendelkezésére a vízum, akkor az IUPAP fenntartja magának a jogot, hogy visszavonja a támogatását az illető konferenciától.

Egy újabb fejlemény, hogy az IUPAP egy *kölcsönzési alapot* hozott létre a konferencia szervezők munkájának a megkönnyítésére, akik ilyen kölcsönt kérhetnek és felhasználhatnak szervezési célokra, mielőtt a konferencia a tényleges IUPAP támogatást megkapná. Ennek a kölcsönnek az összegét természetesen később vissza kell fizetni. Ez az összeg 1000–2000 USA \$ között mozoghat.

Az IUPAP kéri a konferencia szervezőit, hogy a konferencia Proceedings-einek legalább 50 példányát ingyen bocsássa az IUPAP rendelkezésére, amelyet majd a fejlődő országoknak fog szétosztani.

Az IUPAP tagja az ICSU-nak (International Council of Scientific Unions), amely a fizikán kívül más tudományterületeket is magában foglal és egy általános nemzetközi „ernyő” (umbrella) szervezete valamennyi tudományos egyesületnek. Az ICSU 20 tudományos társulatot és 71 nemzeti akadémiát, vagy ennek megfelelő szervet fog össze, továbbá 10 tudományos bizottsága van, amely különböző uniók interdiszciplináris szervezeteit vagy mozgalmait (pl. Nemzetközi Geofizika Év) foglalja magában. Az ICSU rendelkezésére álló szerény pénzügyi alapok az egyes tagországoiktól, azok akadémiáitól származnak, azonkívül kap anyagi segítséget az UNESCO-tól is. Ily módon az ICSU és az IUPAP különböző szálakkal fűződik az UNESCO-hoz. A jövőben feltehetően jobban ki lehet használni az ICSU-ban rejlő lehetőségeket, ha olyan konferenciákat szervezünk, javasolunk, amelyek erősen interdiszciplináris jellegűek és több tudományos uniót érinthetnek. (Pl. a fizika alkalmazása az orvosi kutatásokban és gyakorlatban, vagy félvezető kutatások és alkalmazásuk a számítástechnikában, vagy modern felület vizsgálatok stb.)

Ezt a vázlatos beszámolót azzal szeretnénk zárni, hogy egy rövid ismertetést adunk *a legutóbbi IUPAP közgyűléséről, amelyet 1984. október 8–12 között tartottak Triesztben*, a trieszti International Centre of Theoretical Physics-ben (ICTP). A házigazdaintézetet az UNESCO és a bécsi Atomenergia Ügynökség (IAEA, NAÜ) hozta létre és tartja fenn. Igazgatója a pakisztáni származású Abdus Salam, aki harmadmagával Nobel-díjat kapott az elektromágneses és a gyenge kölcsönhatások

egyesített elméletének a kidolgozásáért. Abdus Salam — érthető módon — szívén viseli a fejlődő országok problémáit, gondjait. Ez lehet az egyik magyarázata, hogy az IUPAP közgyűlésével egy időben került sor a IUPAP egyik bizottságának, a „*Fizika a fejlődésért*” bizottságnak az *első nemzetközi konferenciájára*, amely a fizikáról és alkalmazásairól szolt a fejlődő országok fizikusai számára. A helyszín ugyan-csak a trieszti intézet volt. Közvetlenül az IUPAP közgyűlés után került még sor az *afrikai fizikusok első nemzetközi találkozására* is. A konferencián és az afrikai fizikusok értekezletén bemutatásra került egy magyar atommagfizikai demonstrációs eszköz, a diffúziós ködkamra.

A közgyűlésen Magyarországot az IUPAP magyar Liaison Bizottságának az elnöke (Kiss Dezső, KFKI) és titkára (Turchányi György, SOTE) képviselte. Az egyes tagországok a befizetett tagdíjak arányában álló szavazati számmal rendelkeznek. Hazánk esetében ez kettő. A „*Fizika a fejlődésért*” bizottság konferenciáján Kiss Dezső (KFKI) és Gróf Pál (SOTE) vett részt. Az afrikai konferencián Magyarország nem képviseltette magát, de a Triesztben jelenlevő három magyar képviselő figyelemmel kísérte az ott történeteket.

A közgyűlés ideje alatt ünnepelte egyébként a trieszti nemzetközi intézet fennállásának 20. évfordulóját. Az ünnepségeken megjelent Andreotti, Olaszország külügyminisztere is. (Olaszország komoly mértékben hozzájárul a trieszti intézet fenntartási költségeihez.)

Külön fel szeretnénk hívni a magyar kollegák figyelmét a „*Fizika a fejlődésért*” bizottság munkájára és lehetőségeire, nemcsak azért, mert jelenleg magyar titkára van, hanem mert igen nagy lehetőségeket rejt magában a fejlődő országokkal való kapcsolataink kiterjesztésre (pl. vendég előadói, professzor állások vállalása, tanfolyamok rendezése a fejlődő országbeli fizikusok számára stb.). Ezek mind olyan formák, amelyekkel ez ideig is éltünk, de a jövőben bővíteni lehetne ilyen irányú tevékenységünket, és új ötletek is felmerülhetnek.

Összefoglalóul azt lehet mondani, hogy az IUPAP nemzetközi jellege szerencsére nem csorbult, a felmerülő viták döntő többsége konstruktív volt. Az IUPAP működése egyelőre nagyobb problémáktól mentes; az UNESCO nehéz helyzete csak közvetve érinti, de alapjaiban aligha rendítheti meg. Az IUPAP legközelebbi közgyűlésére 1986-ban kerül sor, valószínűleg Washingtonban.

KÖNYVISMERTETÉS

Roland Glowinski:
Numerical Methods for Nonlinear Variational Problems
Springer Series in Computational Physics
Springer-Verlag, New York, Berlin 1984.

Glowinski könyve a folytonos közegek klasszikus mechanikai feladatainak variációs elvekkel történő megfogalmazásával, és a variációs problémák numerikus megoldásainak módszereivel foglalkozik. Célja a feladatok minél általánosabb formába öntése, és a megoldásukra javasolt numerikus eljárások jogosságának (konvergencia, stabilitás) matematikailag precíz igazolása. Ezt a törekvését a francia iskolától megszokott magas színvonalon valósítja meg. Emellett a látszólag túlságosan elvont (ha csak az absztrakt Hilbert-terek terminusaiban gondolkodunk, egyszerűen megoldhatónak tűnő) feladatokat konkrét, igen nehezen kezelhető fizikai problémák felvetésével és megoldásával illusztrálja. Ilyen igényességgel megírt és gazdag tényanyagot tartalmazó mű azonban önmagában (kiegészítő irodalom nélkül) nem alkalmazható a tárgyalt fizikai problémák numerikus megoldásainak receptgyűjteményeként. A könyv csak elliptikus és parabolikus variációs egyenlőtlenségekkel foglalkozik (az általános problémafelvetés és a fizikai illusztrációk egy része az első három fejezetben található), mert a szerző szerint a hiperbolikus eset vizsgálata jelenleg dinamikusan fejlődik és a közeljövőben jelentős új eredmények várhatók.

A fizikai illusztrációk a folyadékok mechanikájából (pl. kenés, sodrás, szivárgás, folyadékok áramlása csőben) és a rugalmas közegek mechanikájából kerülnek ki (pl. rugalmas képlékeny rúd torzítója). A numerikus megoldás általános alapja a folytonos közegek esetében a végeelem módszer. A felhasznált speciális numerikus módszereket az V. és VI. fejezet elemzi (pl. relaxáció, a kiegészített Langrange-függvény módszere).

A IV. és VII. fejezetben találhatunk példákat a parciális differenciálegyenletekkel és variációs elvvel megadott feladatok ekvivalenciájára. Különösen érdekes és fizikai példákkal jól illusztrált a VII. fejezet, melyben a Navier—Stokes egyenlet paramétertartománytól függő különböző megoldásaival foglalkozik. Ilyen pl. az ún. transzszonikus (hangsebesség közel) tartomány.

Krámli András

A. Benninghoven, J. Okano, R. Shimizu, H. W. Werner (ed-s):
Secondary Ion Mass Spectrometry SIMS III
Springer Series in Chemical Physics 36.
Springer-Verlag, Berlin 1984.

A könyv az Osakában megrendezett 4. nemzetközi szekunder ion tömegspektrometriás konferencia (SIMS IV.) anyagát tartalmazza.

A Springer Kiadó ez alkalommal is a gyorsan fejlődő analitikai technikához illő ütemben 4 hónap alatt jelentette meg a szokásosan szép kiállítású kb. 500 oldalas kötetet, amelyben 26 meghívott előadás anyaga és több, mint száz rövidebb közlemény található. A SIMS IV. jellegzetessége a SIMS-sorozat előző köteteihez képest, hogy igen bőséges a Japánból származó anyag, és első ízben találkozhat az olvasó a kínai SIMS szakemberek munkáival is. Másrészt azonban sajnálatos, hogy a szocialista országok szépen fejlődő SIMS kutatásait csak négy közlemény dokumentálja szovjet, NDK és magyar szerzőktől.

A kötet nem kézikönyv, nem is ezzel a céllal készült, és a SIMS jelenlegi szintjén talán nem is lehetne egy átfogó kézikönyvet készíteni. A SIMS fejlettségi szintje ugyanis érdekes módon polarizált, és ez a kötet fejezetei tartalmi színvonalának összehasonlításában is érződik. Az elmélet még mindig a tíz-tizenöt éves, számtalanszor bírált alapokon áll, ugyanakkor a SIMS metodikája bizonyos területeken (szubmikron ionbombázás, szerves SIMS) szinte meglepő csúcsteljesítményeket mutat,

és ezzel a legfejlettebb ipari technikák igényeit is kielégíti (nagyintegráltságú félvezetőipar, biológiai ipar stb.). A kötet bőséges tájékoztatást ad az olvasónak arról, hogy mit értek el a SIMS legjobb kutatói az utóbbi két-három évben e területeken.

A könyv a konferencia felépítését követve 7 fejezetre tagolódik. A kicsit bőségebb terjedelmű (6–8 oldalas) meghívott előadások lennének hivatva arra, hogy a kívülállóknak áttekintést adjanak az egyes területek legújabb eredményeiről. A könyv talán egyetlen, de nem jelentéktelen hibája éppen az, hogy az invited paper-ek jelentős része csupán részeredményeket tárgyal, az igazán jó átfogó munka kevés. Feltétlenül az olvasó figyelmébe ajánlandó viszont néhány kiváló dolgozat: a szubmikron technikáról H. Liebl és F. G. Rüdenauer összefoglalói, a szerves és biológiai SIMS-ról A. Benninghoven M. S. Burns és H. Kambara munkái, a standardok szerepéről D. E. Newbury áttekintése. Ugyanakkor csalódást kelthet és nem informál eléggé két fontos terület összefoglalása az alapjelenségekről (porlasztás, ionizáció) és a kvantitatívitás jelenlegi állásáról.

Az *alapjelenségekkel* foglalkozó, egyébként igen bőséges fejezetre jellemző, hogy az adatgyűjtés stádiumát jelzi. A dolgozatok java része a többkomponensű rendszerek ionemissziójával, a jelenségek számítógépes szimulációjával foglalkozik érezhetően az ipar által sugallt problémákon keresztül. Az elmélet fejlesztése irányában való előrehaladáshoz bizonyítást az energiaeloszlási mérések járulnak hozzá. Változatlanul komoly, de nem megoldott kérdésnek látszik a kémiai környezet hatása is. A SIMS *kvantitatívitásának* égetően fontos kérdésével viszonylag kevés közlemény foglalkozik, és a súlypont érezhetően a standardokat felhasználó a relatív érzékenységi faktorokkal történő analízis felé toldott el az elméleti tárgyalás visszamaradottsága miatt. A kötet bizonyára egyik legjobb fejezete az *apparatív kérdésekkel* foglalkozó rész. A SIMS technika egyik fejlődési iránya ma a szubmikron (1000 sőt 100 nm alatti) ionnyalábokkal történő bombázás megvalósítása, amit a nagyintegráltságú félvezetőgyártás kíván meg. A már említett két kiváló összefoglaló mellett számos ez irányú közleményt ajánlhatunk az olvasó figyelmébe. Az eredményeket szép fotók is demonstrálják. Új irány a nagyenergiájú (30–40 keV-os) SIMS, amellyel olyan érzékenység is elérhető, hogy ma már a radiokarbonos kormeghatározás is megvalósítható a SIMS-szel. A számítógép és a SIMS kapcsolatának kérdése a kötetben kicsit szűkrefogottnak tűnik, a slágert ma is a 3 dimenziós digitalizált képfeldolgozás jelenti. A *statikus SIMS-ről* szóló fejezet legérdekesebb cikke kétségkívül S. Komiya személyes hangon fogalmazott „zarándokútja” a SIMS történetében. A fejezet többi közleménye jórészt a SIMS és a más felületvizsgáló technikák együttes alkalmazásával kapcsolatosak. A *mélységi profilmeghatározás* a SIMS hagyományosnak tekinthető területe, a könyv számos ez irányú dolgozata érdekes lehet a félvezetők problémái iránt érdeklődőknek, de döntően újat nem ismerhetünk meg a fejezetből. A legmeglepőbb eredményeket bemutató fejezet kétségen kívül a *szerves SIMS-szel* foglalkozó rész: több ezres relatív atomtömegű, bonyolult szerves molekulák vizsgálhatók megbízhatóan ion- (vagy atom-) bombázással. A könyv közleményei alapján is az a megítélésünk, hogy a szerves SIMS egyenértékű partnerként hamarosan felzárkózik szerves tömegspektrometria egyéb ágai mellé elsősorban a nem illékony molekulák szerkezetanalitikájában (pl. a peptidok szekvenciasorának felismerésében). Az *alkalmazásokra* szánt fejezet metallurgiai, biológiai és geológiai cikkeket tartalmaz. Fontos eredményként olvasható ki innen, hogy a SIMS-et ma már a sejtek mikroelem-topográfiai vizsgálatára is használhatják. Számos érdekes közlemény foglalkozik a SIMS-nek az Apolló-program óta szinte hagyományosnak számító területével, a mikroméretű izotópgeokémiai vizsgálatával is.

Összegezve a kötet tanulmányozását feltétlenül ajánljuk nem csak a szorosan vett SIMS-es kutatóknak, de a félvezetőiparban, biológiában, gyógyszerkémiaiában, geológiában, metallurgiában tevékenykedő szakemberek száma is. Meggyőződésünk, hogy egy új technika legújabb eredményei oldaláról új szempontokat kaphatnak kutatómunkájukhoz.

Dr. Riedel Miklós

T. Matsubara and A. Kotani ed.-s:
Superconductivity in Magnetic and Exotic Materials
Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New-York, Tokio 1984.

A japán tudományos fejlődés ékes példája ez a könyv, amelyet a Springer a Szilárdtest—Tudomány sorozat 52. köteteként jelentetett meg.

A mű a szupravezetés jelenleg nagyon aktuális és érdekes problémáit tárgyalja mély alaposággal és ugyanakkor ökonomikus széleskörűséggel.

A könyv anyaga az 1983 novemberében a Kashikojimában (Japán) megtartott, szűk körű, nemzetközi szimpózium előadásait foglalja össze, amelyek fő témája a mágneses szupravezetés és az ahhoz kapcsolódó kérdések voltak. E konferencián olyan új és izgalmas problémákat diszkutáltak a résztvevők, amelyek nagy hozzájárulást jelentenek a szilárd testek kutatásának modern fejlődéséhez, és érdemesültek az ilyen gyors publikálásra.

A könyv a bevezető fejezete ezen aktuális problémáknak egy rövid és kitűnő összefoglalását adja meg és felvázolja a mágneses szupravezetők, a szerves szupravezetők, a nehéz fermion szupravezetők és az egzotikus szupravezetők kutatásának leglényegesebb elemeit.

Az első fejezetet témája a ferromágneses szupravezetők vizsgálata és ezen belül a neutron szórási vizsgálatokat, a ferromágneses szupravezetők elméletét, a ritka földfém és aktinida-vegyületeket, a ferromágneses szupravezetők elektromágneses jellemzőit, a Josephon-effektus idetartozó vonásait és az inhomogén szupravezető állapotot ismerteti.

Az antiferromágneses szupravezetőkkel foglalkozó második fejezetet fő kérdései az antiferromágneses szupravezetők elmélete, a szupravezetés és antiferromágnesség koegzisztenciája, az egydimenziós antiferromágneses szupravezetők és a szennyezők hatása antiferromágneses szupravezetőkre voltak. A leírás nem csak metodikailag, hanem az új ismeretek szempontjából is tanulságos.

A harmadik fejezetet a szerkesztők a szerves anyagok szupravezetésének szentelték, ahol az egyes szerzők az organikus szupravezetők általános kérdéseit, a szerves sók szupravezetésének elméletét, továbbá a sűrűség-hullámok és az infravörös vezetés problémáit elemezték.

A negyedik fejezet a $\text{BaPb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{O}_3$ és egyes fém-hidridek vizsgálatát tűzte ki céljául. Ezen belül két alapkérdéssel foglalkoztak. Vizsgálták annak lehetőségét, hogy a $\text{BaPb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{O}_3$ a szupravezetés erős csatolási limitjének tekinthető-e, továbbá bizonyos fém-hidridek szupravezetésének problémáját.

Végül az érdemi tárgyalást egy olyan függelékkel egészítették ki, amely a szupravezető anyagok új japán kutatási tervét ismerteti, és bepillantást enged azokba a nagyratörő vizsgálati elképzelésekbe, amelyekről azt remélik, hogy Japán e területen is méginkább az élre emelik.

Az alacsony hőmérsékletek és általában a szilárdtest fizika szempontjából imponálóan megragadó, mindössze 209 oldal terjedelmű, kis alakú könyv várhatóan a legújabb kutatási eredmények olyan tárházának fog bizonyulni, amely kiemelkedő színvonalával és ismeretgazdagságával méltó arra, hogy minél többen elolvassák és tudást merítsenek belőle.

Kirschner István

Brian Davies:
Integráltranszformációk és alkalmazásai
Műszaki Könyvkiadó, Budapest 1983.

Bár az integráltranszformációk a matematika és a műszaki tudományok fegyvertárának gyakran alkalmazott módszerei közé tartoznak, a témakörben eddig nem volt olyan magyar nyelven is hozzáférhető mű, mely a Laplace- és Fourier-transzformációkon lényegesen túlment volna. Ezt a hiányt pótolja az ausztrál matematikus szerző most lefordított könyve, mely az említetteken (I. és II. rész) kívül a Mellin- és Hankel-transzformációt, valamint a Green-függvénnyel generált integráltranszformációkat is tárgyalja (III. rész), sőt IV. részében ezekhez kapcsolódó speciális eljárásokat ismerttet egészen a numerikus végrehajtásig adva útbaigazítást az olvasónak. Ezek közé az eljárások közé tartozik a magyarul eddig nem ismertett Wiener—Hopf-módszer, a Cauchy-integrálok alapuló módszerek, Laplace-módszere közönséges differenciálegyenletekre, és a Laplace-transzformáltak numerikus inverziója. A szerző nem annyira matematikai monográfiát írt, mint inkább kézikönyvet az integráltranszformációkat alkalmazni kívánók számára, amint ezt a könyv címe is sugallja. Ennek megfelelően a szerző elhagyta a formális bizonyításokat, ami nem jelenti azt, hogy nem vezetné be és használná korrektil az általánosított függvényeket (disztribúciókat) vagy a komplex függvénytan módszereit. A könyv nagy gondnal összeállított irodalomjegyzéket és további hivatkozásokat adó lábjegyzeteket tartalmaz, ahol a kezelhetőség érdekében vagy egyéb okból elhagyott eljárásvariánsok és a további speciális alkalmazások megtalálhatók. A könyv első 20 alfejezete feladatok sorával zárul, ami az anyag aktív feldolgozásán kívül további kitekintésre is lehetőséget ad. Sajnos az utolsó, 21., tehát éppen a leggyakorlatiasabb alfejezet végén ez hiányzik. A könyv megírása (mintegy 6—7 év) óta ugyan megjelentek újabb eljárások is a numerikus alkalmazásokra, de ez inkább a témakör aktualitását bizonyítja és nem befolyásolja lényegesen a könyv használhatóságát.

A könyv ajánlható matematikusokon és elméleti fizikusokon kívül a többi természet- és műszaki tudományok művelői és tanulói közül mindazoknak, akik munkájuk során differenciál- és integrálegenletek és egy sor más feladat megoldásához megfelelő és korszerű matematikai módszereket kívánnak használni.

(C. G.)

Landolt—Börnstein:

Crystal and Solid State Physics, Volume 18. Supplement to Volume III/11.
Elastic, Piezoelectric, Pyroelectric, Piezooptic, Electrooptic Constants and Nonlinear Dielectric Susceptibilities of Crystals.
 Editors K. H. Hellwege, A. M. Hellwege.
 Springer, Berlin 1984.

A méreteivel, igényeivel és pontosságával lenyűgöző Landolt—Börnstein sorozat újabb kötete került ki a nyomdából, hogy adattömegével a szilárdtestfizikusok és a legkülönbözőbb kristályokat alkalmazók kézikönyve legyen.

A jelen kötet az 1979-ben kiadott azonos című III/11. kötet pontosítása és kiegészítése a szakirodalomban 1982 elejéig megjelent cikkek eredményeivel. Az új kötet a régivel együtt képez egészet, a szerzők csak kevés adatot ismételnek meg a változatlanok közül. A bevezetők csak a jelöléseket, egységeket és rövidítéseket rögzítik, néhány, az újabb módszerekre, elméletekre, és a táblázatok használatára vonatkozó megjegyzés kíséretében.

Az anyagállandó-tenzorok a kötet cím szerinti sorrendben, ezen belül a kristályosztályok szerinti beosztásban találhatók. A táblázatrengetegben való eligazodást betűrendes képlet- és anyagnévkatalógus segíti.

(C. G.)

W. Eisenmenger, K. Lassmann, S. Döttlinger (eds):

Phonon Scattering in Condensed Matter
Proceedings of the Fourth International Conference
University of Stuttgart, Federal Rep. of Germany, August 22—26, 1983.
 Springer, Berlin 1984.

A könyv, mely a Springer Series in Solid State Sciences 51. köteteként jelent meg (sorozatszerkesztő M. Cardona), a kondenzált rendszerekben végbemenő fononszórási folyamatok területén legfrissebb eredményeket tartalmazza, az 1983-ban Stuttgartban rendezett nemzetközi konferencia előadásainak részben rövidített szövegei formájában. A konferencia, hasonlóan az 1979-ben Providence-ben (Rhode Island, USA) és az 1975-ben Nottinghamban (Anglia) szervezett elődkonferenciákhoz, főleg a magas frekvenciás haladóhullámú akusztikai fononokkal, mechanikai hullámokkal és hővezetéssel foglalkozott. A rácsdinamika, optikai fononok, fázisátalakulások stb. csak annyiban szerepeltek a tematikában, amennyiben szerepük van az akusztikus fononok szóródásában, terjedésében és generálásában. Ez utóbbi folyamatokat, az akusztikus fononok detektálásával együtt viszont az előadások nagy mélységben tárgyalták. Mivel az akusztikus fononok a legtöbb — szilárdtestben és folyadékban lejátszódó — energiaátadási folyamatban részt vesznek, a terület jelentősége egyre nő. A stuttgarti konferencián is egyrészt érdekes új fejleményeket ismertettek, másrészt lényeges előrehaladásról számoltak be olyan ismert problémákkal kapcsolatban, mint pl. a Kapica-ellenállás.

A kötet 13 meghívott előadást és 105 további előadást tartalmaz, azonkívül a viták során elhangzottakat is rögzíti.

A könyv elsősorban a szakterület kutatói számára hasznos, de különösen a részletesebb, meghívott előadások révén arra is alkalmas, hogy áttekintést nyújtson a témakörrel a szomszédos területeken dolgozók vagy specializálódó egyetemi hallgatók számára.

C. G.

D. H. Auston and K. B. Eiseenthal (eds):

Ultrafast Phenomena IV
Springer Series in Chemical Physics 38.

Nanoszekundum, szubnanoszekundum, pikoszekundum, femtoszekundum... már megunták a konferencia-sorozat szervezői, hogy 2—3 évenként átkereszteljék összejelölésüket, mely ezt megelőzően még a „Pikoszekundumus jelenségek” címet viselte. Nemes egyszerűséggel választották az „Ultragyors jelenségek” elnevezést. Ez most már, remélhetőleg sokáig kitart.

Attól a közeljövőben nem kell tartani, hogy a fenti témában negyedik alkalommal, most 1984 júniusában Monterey-ben, Californiában megrendezett konferencia-sorozat — melynek anyagát tartalmazza a kötet — anyaghiány miatt megszakad. A tanulmányozott jelenségek időtartamával fordított arányban nő a terület, és jelentősége. Érdekes forgatni a 15—20 évvel ezelőtti gyors, főleg elektronikai folyamatokkal foglalkozó könyvek után a maiakat. A hihetetlenül rövidnek tűnő nanoszekundumos jelek időtartama több mint öt nagyságrendet esett, s az optika, abból is a lézerfizika vette át a vezető szerepet.

Bármilyen gyors is a könyvkiadás, ez a kötet még nem tartalmazza a pillanatnyilag világsúcs-tartó: 12 optikai ciklusig tartó, néhány femtoszekundumos fényjel konkrét előállítási módját, de az ahhoz vezető út minden állomását már fellelhetjük. Félő, hogy mire ez a bíráló megjelenik már más lesz a csúcs.

Néhány éve még lelkesen magyaráztuk a pikoszekundumos fényjelek csodálatos lehetőségeit, s máris új területre tévedtünk. Minden igaz a korábbiakból, csak minden egy kicsit „még igazibb”. A femtoszekundumos (no azért még csak néhány tíz, vagy néhány száz fsec) fényimpulzusok generálásának kulcsát a szoliton lézereket, a fényvezetőkkel végezhető impulzusösszenyomást, az ultrarövid impulzusok nemlineáris anyagokon történő „ütköztetését”, s mérésüknek lehetőségeit közel harminc — köztük igen kiemelkedő magyar — cikk ismerteti.

Ezekután következnek az alkalmazások és alkalmazási lehetőségek sora, aminek csak kis, de jelentős részét képviseli a tranziens lézeres fotobiológia és fotokémia, látszólag indokolva, hogy a Springer miért a Kémiai és nem Optikai sorozatába illesztette a kötetet. Nem ez volt az ok, ne téveszsen meg senkit! Nem csak vegyészek, hanem fizikusok, nemlineáris folyamatokkal, koherens terjedéssel, gyors perturbációk relaxációival és elektronikával, opto-elektronikával foglalkozók is találkozhatnak szép számú újdonsággal.

A taglalt optikai jelenségek a teljesen általánosan vett anyagtudományok minden területén új kutatási lehetőséget nyújtanak. Az optika, a spektroszkópiához hasonlóan (esetenként a két jelenség kombinációjaként, mint ultragyors spektroszkópia) egy további eszközt ad a kutatók kezébe.

Vége az elektronika képviselői is felismerték, hogy a még nagyobb sebességgel működő mikroelektronikai készülékek készítésének lehetősége elkerülhetetlenül az optikával való házasságon keresztül vezethet csak eredményre. Bár még „csak” pikoszekundumos szinten, de már nagy számban találhatunk cikkeket a jövő elektronikájának alapját képező ultragyors optika területéről, s természetesen nagy terjedelmet kapott az ultragyors elektronikában később felhasználandó anyagok, azok különlegesen gyors fizikai optikai, és kémiai tulajdonságainak vizsgálata.

Horváth Zoltán

D. Bäuerle (ed.):
Laser Processing and Diagnostics
Springer Series in Chemical Physics 39.

A kötet címe talán félrevezető, mert hatalmas kutatási terület eredményeinek gyűjteményét sejteti. A bevezetés azonban gyorsan helyreigazít, kiírja a konferencia teljes címét, aminek meghívott és „rendes” előadás kivonatait tartalmazza. Eszerint az 1984 júliusában Linzben, Ausztriában megrendezett: „Lézeres megmunkálás és diagnosztika — felhasználása az elektromos anyagok területén” c. konferencia anyagát tartjuk kezünkben.

Több mint 15 éve, hogy a lézerek megjelentek a mikromegmunkálás, a félvezetőgyártás, mikroelektronika területén is. Akkor és azóta számos olyan új, érdekes jelenséget fedeztek fel mely lassan-lassan elengedhetetlen feltétele, eszköze bizonyos területeken a mikroelektronikai iparnak. A mikron körüli méretre fókuszálható lézersugár nagyvákuum nélkül is kiválóan alkalmas felületek megmunkálására, tisztítására, felületkezelésre speciális anyagok felvitelére és eltávolítására. Különleges fotokémiai és extrém gyors fűtési és hűtési jelenségek játszódnak le a lézerfény hatására. A kis területek aktiválhatósága, kombinálva az érzékeny optikai módszerekkel unikális vizsgálati lehetőségeket nyújt.

Mindezek felsorolása túlmegy egy ismertető terjedelmén. A közel hetven előadás, majd ugyanannyi alkalmazási lehetőséget vázol, az érdeklődő maga választhatja ki saját területének csemegéit.

A határunktól jó 3 órányira levő konferencián, a bevezető szerint magyar résztvevő(k?) is volt(ak?), ugyanakkor a magyar előadások hiányoztak.

Alaposan el kellene gondolkodni azon, hogy egy országosan többszörösen kiemelt program egyik nem jelentéktelen vetülete miért van olyan szinten hazánkban mint amilyeneken van?

Néha már tudománpolitikai koncepciónak hat a lézerek kutatásának, a fejlesztési lehetőségek meg nem adásával történő visszafejlesztése.

Tragikus következménnyel járhat az, hogy az e területen dolgozó kutatók realitásérzéke eddig meggátolta, hogy többmillió dolláros lézerfúziós monstrumok építésébe kezdjünk, amiknek melléktermékeként már virágzó kutatási és alkalmazási kultúra alakult volna ki. A józan szerénység tehát így nyeri el méltó büntetését.

Különösen figyelemre méltó ez a körülmény akkor, ha a hazai mikroelektronikai kutatások céljait egybevetjük az utóbbi hónapok világszerte elfogadottnak látszó elképzeléseivel, melyek szerint az igen nagy kapacitású memóriák elkerülhetetlen hibajavítása vagy a kis sorozatú, felhasználó-orientált mikron méretűnél nem sokkal finomabb felbontást igénylő áramkörgyártási technológiák kulcsának a lézereket tartják.

Az érdeklődőknek fantáziaserkentőnek, ajánlom a könyv lapozgatását!

Horváth Zoltán

E. E. Nikitin, S. Ya. Umanskii: Theory of Slow Atomic Collisions
Springer Series in Chemical Physics 30.

Ebben a könyvben nem másról van szó, mint az elemi kémiai történet — *a reakció* — tetten-éréséről. Mintegy harminc éve a nagynyomású tömegspektrometria kifejlődésével vált először lehetővé, hogy a kémiai reakciókat ne sokaságokon, hanem egyedi ütközésekben tanulmányozzuk. Az azóta eltelt időben a molekulásugár technika, a kémiai szórás kísérletek elterjedésével nagyszámú elemi kémiai reakció dinamikai részleteit sikerült felderíteni. Az elméleti kutatások az ötvenes évek végén a gázfázisú reakciók kinetikáját és az abszolút sebességi elméletet alapul véve indultak el. A feladatot akkor úgy fogalmazták meg, hogy a reakció sebességi állandóját a reagáló molekulák mikroszkopikus sajátságaiból, továbbá a reagáló sokaság paramétereiből kell levezetni. Nikitin professzort már ekkor ott találjuk a kutatások frontvonalában. Ezekről az eredményekről számolt be az 1966-ban lezárt, de csak évekkel később megjelent „Theory of Elementary Atomic and Molecular Processes in Gases” című könyv (oroszul: „Himija”, Moszkva, 1970; angolul: Clarendon Press, Oxford 1974).

A Springer sorozat 30. kötete esetében az átfutás rövidebb volt. Az orosz változat gyakorlatilag a munka lezárulása után röviddel, 1979-ben megjelent („Atomizdat”, Moszkva). Igaz az angol fordítás csak 1984-ben került kiadásra azonban nem az eredeti, hanem — az irodalomjegyzékből is kivehetően — felfrissített, „naprakész” formában.

A könyv a reakciódinamika legjobban körüljárt részét a lassú atomi ütközéseket tárgyalja. Olyan ütközési energiákról van szó, ahol az atomok sebessége jóval kisebb mint az elektronok sebessége az atomon belül. Ez a feltétel a kémiában szokásos körülmények között általában teljesül.

Rövid bevezetés után a második fejezet felfrissíti az olvasó ismereteit a kvázi-klasszikus rugalmatlan ütközések leírásáról, részletesen tárgyalva az atomi ütközések esetét. A harmadik és negyedik fejezetben azt a felismerést mutatják be a szerzők, hogy az atomi ütközések hatáskeresztmetszetének meghatározása két független részre bontható: először az ütköző részecskéket egy rendszernek tekintve, a kétatomos elektronállapotok leírása, másodsor a szórásprobléma megoldása a magokra.

Az ötödik fejezetben az egysatornás, rugalmas szórás esetét tárgyalják részletesen. Fény derül a kvázi-klasszikus közelítés korlátaira, a fordulópontok leírására. A hatodik fejezet metodikai jellegű: a többcsatornás kvázi-klasszikus szórás-mátrix közelítő meghatározásával foglalkozik. Legtöbb esetben kielégítő leírást érhetünk el, ha csak két kvantumállapot erős csatolásával számolunk. Ezekkel az úgynevezett kétállapot modellekkel foglalkozik a következő három fejezet. Az általános tulajdonságok leírása után az általánosított lineáris Landau—Zener-modell, majd nemlineáris problémák tárgyalása következik. A tizedik fejezet kettőnél több állapot erős csatolásával foglalkozik.

Az utolsó fejezetet igen didaktikusan egy konkrét rendszer, a széles körben tanulmányozott gerjesztett alkáli atom—nemesgázatom ütközések leírásának szentelik a szerzők.

Világosan érzékelhető az egész könyvben az elméleti reakciódinamika törekvése: az atomi molekuláris jellemzőkből kiindulva eljutni az egyes reakciócsatornákra a differenciális hatáskeresztmetszetekhez és átmeneti valószínűségekhez. Jó szívvel ajánlom ezt a munkát mindazoknak, akiket érdekel a terület. Bizonytalan megfogalmazásom oka az, hogy nálunk ez a harminc éve töretlenül és dinamikus fejlődő diszciplína mostohagyerek: a vegyészek a fizikusokra mutogatnak, mondván ez inkább fizika, a fizikusok viszont eleve gyanakvással fogadják, hiszen köze van a kémiához. Így azután mindkét tantervből kimarad.

Vértés Ákos

**Dombrádi Zsolt—Fényes Tibor (szerk.): In-Beam Nuclear Spectroscopy.
Akadémiai Kiadó 1984.**

A debreceni Kísérleti Magfizikai Iskola integráns és történetileg korán kialakult része a magspektroszkópia. Ezért érthető, hogy az ún. In-Beam Magspektroszkópiái Nemzetközi Szimpóziumot (INS — In-Beam Nuclear Spectroscopy) éppen Debrecenben tartották 1984. május 14-től 18-ig. Mindnyáján örömmel nyugtáztuk, hogy debreceni kollégáink kísérleti eredményei olyan magas színvonalúak, hogy lehetővé tették egy nemzetközi rendezvénynek éppen Debrecenben való megszervezését. A konferencia főszervezője és egyben a szervezőbizottság elnöke, Fényes Tibor, a fizikai tudományok doktora volt. A konferencia anyaga egy kétkötetes Proceedings formájában írásban megjelent: Dombrádi Zsolt és Fényes Tibor szerkesztésében, az Akadémiai Kiadó gondozásában, mégpedig dicséretes gyorsasággal. A kiadvány mintegy 110 előadást foglal magában, 20 ország 85 kutatóintézetéből, ill. egyeteméről. Ezeknek több mint felét az in-beam magspektroszkópiái tárgyú és tematikájú előadások tették ki, a többi magreakciókkal, technikai kérdésekkel, ill. elméleti számításokkal foglalkozott. Az összesen 820 oldalt tartalmazó két kötet az alábbi fejezeteket foglalja magában:

- I. A közepesen nehéz magok szerkezete ($Z < 50$)
- II. A közepesen nehéz magok szerkezete ($50 \leq Z < 82$)
- III. Nehéz magok szerkezete ($Z \geq 82$)
- IV. Magszerkezetek kutatása könnyű és nehéz ionreakciókkal
- V. Az in-beam magspektroszkópia technikája
- VI. Magmodellek és modellszámítások
- VII. Az in-beam magspektroszkópia új aspektusai

A könyvet Z. Sujkowski összefoglaló előadása zárta. Utána a szokásoknak és hagyományoknak megfelelően a résztvevők listája (és fényképe), valamint a tárgymutató következik.

Megjelent kiadvány magas szintű, részletes, professzionista összefoglaló magspektroszkópiával foglalkozó (elsősorban kísérleti) szakemberek számára — mint ahogy az volt maga a konferencia is. Lapjait haszonnal forgathatják a magfizika művelői, egyetemi előadók és felsőbb évfolyamú, a tárgy iránt érdeklődő egyetemi hallgatók is.

Kiss Dezső

**Sallie L. Baliunas and Lee Hartmann (eds):
Cool Stars, Stellar Systems and the Sun
Lecture Notes in Physics 193.
Springer, Berlin 1984.**

A közkedvelt sorozat jelen kötete a „Hideg csillagok, csillagrendszerek és a Nap” címmel harmadizben Cambridge, Massachusetts-ben 1983 októberében megrendezett „Workshop” előadásait tartalmazza.

Az utóbbi években kitűnt, hogy az alacsony hőmérsékletű („hideg”) csillagok felületén több olyan jelenség is megfigyelhető, amely analógiába hozható bizonyos napjelenségekkel. A Workshop legtöbb előadása ilyen témakörrel foglalkozott. Az elhangzott 59 előadás 6 csoportra osztható.

1. *A főág előtti csillagok* témakörben az előadások zöme a T Tauri típusú csillagok jelenségeit tárgyalja. Külön érdeklődésre tarthatnak számot azok az előadások, amelyek ezeknek a csillagoknak a röntgensugárzásairól számolnak be. F. M. Waeter pl. 32 megfigyelt T Tauri csillag közül 16-ot talált röntgenforrásnak.

2. *A fősorozatbeli csillagok forgása és aktivitása* című fejezetben a késői típusú csillagok kromoszférajának észleléséről esik szó, amely lehetővé teszi ezen csillagok forgási periódusának meghatározását. Igen érdekes A. Yung, A. Skumanich, C. Heller és S. Temple cikke a GILSE 890 nevű csillagról, amely igen gyorsan, kevesebb, mint 0,5 nap alatt fordul meg a tengelye körül. Ugyanebben a fejezetben érdekes cikket olvashatunk a napfoltok hőmérsékletének a napfoltciklustól való függéséről is.

3. A Workshop keretein belül (ez képezi a könyv 3. fejezetét) érdekes összefoglaló előadás hangzott el az *IRAS* mesterséges hold mérési eredményeiről.

4. *Az aktív, fejlődő csillagok* témakörben különös figyelmet érdemel J. D. Dorren és E. F. Guinan cikke a Lambda Andromedae csillagról, amelyen 6 éves periódusú foltciklust sikerült kimutatniuk.

5. *A fősorozat utáni csillagok* fejezet a vörös óriáscsillagok légkörének kérdésével foglalkozó előadásokat tartalmazza.

6. Külön ülést szenteltek a Workshop keretein belül az *Alfa Orionis* nevű csillagnak. Ez a vörös óriáscsillag (másik nevén Betelgeuse) viszonylagos közelsége miatt különös érdeklődésre tarthat számot. Különösen érdekes S. A. Drake és J. L. Linsky előadása, amely az ilyen típusú csillagok tömegvesztésére ad megbecslést.

A könyvet melegen ajánlhatjuk azoknak a kutatóknak, akik napfizikával, nap–föld fizikai kapcsolatokkal és a csillagok kialakulásával foglalkoznak.

Dr. Marik Miklós

**G. Schmall and D. Rudolph (editors): X-Ray Microscopy
Springer Series in Optical Sciences, Vol. 43.
Springer-Verlag, Berlin 1984.**

A röntgen mikroszkópia megvalósítása elsősorban biológiai alkalmazásainál jelentenek merőben új lehetőségeket, hiszen felbontóképességével közel állhatna az elektronmikroszkópiához, miközben a vizsgálandó mintával szemben támasztandó követelmények sokkal enyhébbek (pl. víztartalmú, sőt élő anyag is vizsgálható). Azt az alapvető akadályt, hogy — az egyhez nagyon közel álló törésmutató miatt — a röntgensugárzás számára közönséges lencsék nem készíthetők, kezdetben Bragg-reflexió és sűrűlő becsűrű totálreflexió tükrökkel próbálták áthidalni, bár Baez már 1952-ben vizsgálta zónalemezek használatának lehetőségét. Ez akkor technológiailag megvalósíthatatlan volt.

A nagy intenzitású lágy-röntgen források (pl. szinkrotron) és a félvezető iparban kidolgozott különleges technológiák (elektronlitográfia, sokrétű szerkezetek) megjelenése azonban döntő változást hozott. Erről ad nagyon jó áttekintést a könyv, amely tulajdonképpen a Göttingenben 1983. szept. 14—16 között megtartott nemzetközi konferencia előadásait tartalmazza, az alábbi 6 részre tagoltan:

1. Lágy-röntgen források (5 előadás)
2. Röntgen optika (12 előadás)
3. Detektorok (2 előadás)
4. Röntgen mikroszkópok (7 előadás)
5. Alkalmazások (9 előadás)
6. Röntgen holográfia (2 előadás)

Az előadások megoszlása nagyjából híven tükrözi az egyes témakörök aktualitását, súlyát. A sok független szerző anyaga végül is meglehetősen egységes kötetté állt össze, amelyben feltűnően kevés az ismétlés. Az egyes cikkek bemutatására nincs mód, de legalább röviden érdemes utalni az előadásokból kiolvasható fontosabb eredményekre, ill. a várható fejlődési irányokra.

A nagy intenzitású röntgenforrások között az undulátorral felszerelt szinkrotron már-már klasszikussá válik, és elsősorban a méreteiből adódó hátrányok miatt jelentős munka folyik az impulzus üzemben működő plazma források fejlesztése terén is. (Ez még a röntgen litográfiában is érdekes lehet!)

Az optikai rendszerek szempontjából a nagy lépést a zónalemezek megvalósítása jelenti. Több előadás foglalkozott mind ezek elméleti kérdéseivel, mind a gyakorlati megvalósítás lehetőségeivel. Itt az elektronlitográfia és lézerinterferencia módszereket egyaránt megtaláljuk, de nem kétséges, hogy az elektronlitográfia a jövőben meghatározó szerepe lesz. A sokrétű, közel merőleges beesésű tükrö-optikák ma még távoli ígéretnek tűnnek.

Működő, tényleges feladatokra is alkalmazható mikroszkópról kevesen számoltak be. Többesgüik kísérleti stádiumban, építés alatt áll, de a nyugat-berlini BESSY tárológyűrűhöz telepített göttingeni mikroszkóppal kb. 200-szoros nagyítást értek el, és ez a kép optikailag még tovább nagyítható. (A mikroszkóp közvetlen leképezésű, a leképező mikrozónalemez utolsó, 251. gyűrűjének átmérője 27,8 μm . és a felbontóképesség $\approx 100 \text{ nm}$.) Reális remény van ilyen mikroszkóppal a 10 nm-t megközelítő felbontás elérése. Az épülő mikroszkópok többsége azonban pásztázó rendszerű. Ennek fő előnye, az elektronikus jelfeldolgozás lehetősége mellett, a kis sugarterhelés és az egyéb egyidejűleg végezhető vizsgálatok lehetősége (pl. fotóelektron röntgen-mikroszkópia).

Az — úgyszólván kizárólag biológiai — alkalmazások azonban úgy látszik eddig még mindig a kontakt mikroszkópiára (radiográfiára) támaszkodnak, természetesen már szinkrotron sugárzás

felhasználásával, és az eredmények meglepően jók. A 10 nm körüli felbontás elvben itt is lehetséges, a bemutatott képek azonban még elmaradnak ettől.

Mindez megerősíti azt a véleményyt, hogy a röntgen mikroszkópia már ma is használható, a többi módszert jól kiegészítő eljárás, elsősorban akkor, ha az elektronmikroszkópiával szokásoshoz képest vastag mintát kell vizsgálni és (vagy) nem célszerű mindezt vákuumban végezni. Ha hozzátesszük ehhez, hogy az alkalmazott hullámhossz tartományban a víz és a fehérjék abszorpciója között kb. egy nagyságrend különbség van, a biológia érdekeltsége nyilvánvaló.

Zsoldos Lehel

**H. Ulrich and G. J. B. Probst (eds): Self-Organization and Management of Social Systems. Insights, Promises, Doubts and Questions
Springer-Verlag, Berlin 1984.**

A kötet a H. Haken által szerkesztett sorozat, a Springer Series in Synergetics 26. kötete, amely egy 1983-ban Svájcban rendezett interdiszciplináris kollokvium anyagát foglalja magában. A tanulmányok azt a kérdést vizsgálják, hogy a fizikai és biológiai jelenségek alapján kifejlesztett önszerveződés elmélet mennyiben alkalmazható a társadalomtudományban, s ezen belül az irányítás elméletében.

A könyv két részre tagolódik. Az első rész — Az önszerveződés elve fizikai, biológiai és szociális rendszerekben — tanulmányai az önszerveződő rendszerek általános, kategoriális jellemzésére töreksenek. (H. von Foerster: Az önszerveződés elvei — társadalomirányítási kontextusban; F. J. Varela: Az önszerveződés két elve; H. Haken: Használható-e a szinergetika az irányítás elméletében; R. Riedl: Önszerveződés — néhány elméleti összefüggés; P. H. Hejl: A szociális rendszerek elmélete felé: önszerveződés és önfenntartás, ön-referencia és színreferencia.)

A második rész — Önszerveződés és irányítás — írásai a szociális rendszerek sajátosságait vizsgálják. (H. Ulrich: Irányítás — egy félreértett szociális funkció; P. B. Checkland: Rendszer-gondolkodás az irányításban: A lágy rendszerek metodológiájának kifejlesztése és alkalmazása a társadalomtudományban; F. Malik és G. J. B. Probst: Evolúciós irányítás; F. Malik: Rendszerszem-pont az irányításban. — Remények, ígéretek, kételyek. — Számos kérdés és néhány utógondolat; G. J. B. Probst: Kibernetikai elvek a társadalmi rendszerek tervezésére, ellenőrzésére, fejlesztésére, és néhány utógondolat; P. Dachler: Az organizmikus analógiák határai a szociális rendszerek meg-értésében.)

A szerzők egy része, abból kiindulva, hogy a különböző szociális rendszerek tudatos, célkitűző emberek interakciói által jönnek létre, úgy véli, hogy az általános rendszerelmélet elvei, illetve a természetes rendszerek spontán folyamataiból leszűrt konklúziók nem vihetők át a társadalomra. Ezekkel az álláspontokkal szemben Malik és Probst azon a véleményen van, hogy valójában nem a célok, akaratok, tervek, hanem az emberi tevékenység konstituálja a szociális rendszereket, s hogy továbbá e rendszerek irányítói maguk is részei a rendszernek, következésképp a szociális rendszerek osztoznak az önszerveződő rendszerek általános tulajdonságaiban, a felismert összefüggések átvihetők, sőt — a jelenkori gazdasági világ helyzetet figyelembe véve — át is kell vinni az irányításba. Fontos szempontot ad Varela egyik megállapítása, hogy az önszerveződő rendszerek organizációjának megőrzése struktúrájuk változásán keresztül megy végbe. Felhívják a figyelmet — kibernetikai modellekből leszűrt — arra az összefüggésre, hogy a rendszerek éppoly jól — vagy jobban — tudnak alkalmazkodni a környezethez, ha nem direkt utasítások, hanem általános szabályok alapján működtetjük őket.

Szembekerülnek ugyanakkor magának az általános rendszerelméletnek olyan — a kötet szerzői közül Foerster, Varela, Checkland által képviselt felfogásával, amely pusztán egy lehetséges leírási módként kezeli, a rendszerszerűséget, tehát nem tekinti a reális világ attributumának.

A kötet — amely az önszerveződés elméletének reprezentáns képviselőit fogja át — a konfrontáció és a rövid, lényegretörő kifejtés kényszere következtében világos helyzetképet ad az önszerveződés elméletének jelenlegi állásáról, az eredményekről és nyitva maradt kérdésekről egyaránt, valamint évszázados — túlhaladottnak tűnt — filozófiai beállítottságok új terminológiába bújtatott továbbéléséről. Valószínű, hogy — legalábbis részben — ilyen szemléletmódok következménye az, hogy az önszerveződő rendszerek elvi leírásai nem irányulnak a rendszerek keletkezési folyamatának, sem pedig azoknak a feltételeknek a kutatására, amelyek között ilyen típusú rendszerek létrejöhetnek.

Újhelyi Mária

**Y. Kuramoto (ed.): Chaos and Statistical Mechanics.
Proceedings of the Sixth Kyoto Summer Institute.
Springer Series in Synergetics. Vol. 24. 1984.**

A Sixth Kyoto Summer Institute, amelyre 1983. szeptember 12. és 15. között került sor, témája „Káosz és Statisztikus Mechanika” volt. E rendkívül aktívan kutatót és szerteágazó témakörben a szervezőknek sikerült a téma olyan neves európai és amerikai szerzőit összegyűjteni, mint J. Yorke, M. Widom, S. Shenker, P. Couillet, U. Frisch, A. Libchaber, H. Swinney, M. Nelkin, B. Mandelbrot és G. Iooss. Az előadások nagyobb része azonban arról ad képet, hogy milyen irányokban érnek el eredményeket az ázsiai — természetesen elsősorban a japán — iskolákban. A kötet széles spektrumát leírni jelen keretek között lehetetlen, ezért elégedjünk meg most is a fejezet-címekkel (zárójelben a témakörben publikált előadások száma áll): I. Általános elmélet (3); II. Fraktálok dinamikai és sztochasztikus rendszerekben (5); III. A káosz kialakulása (5); IV. Egydimenziós leképezések (4); V. Bifurkációk és normálformák (6); VI. Szolitonok (2); VII. Folyadékok dinamikája (7); VIII. Kémiai és optikai rendszerek (2); IX. Szokatlan fluktuációk (2).

Sz. D.

**J. Van Bladel: Relativity and Engineering
Springer Series in Electrophysics Vol. 15. Edited by L. B. Felsen.
Springer-Verlag, Berlin 1984.**

A relativitáselmélet témaköréből már olyan sok könyv jelent meg, hogy azt gondolhatnánk, nem lehet a szakemberek számára újat mondani, ha csak nem a kutatások legújabb eredményeit összefoglaló műről van szó. J. Van Bladel ezt a nézetünket 1984-ben megjelent könyvével megcáfolja. Már a könyv címe is felkelti az érdeklődést a tartalom iránt.

A relativitáselmélet elveinek és alapvető tételeinek ismertetése után igen széles körű alkalmazást talál az olvasó olyan területekről, amelyek nemcsak a fizikusok, hanem a technikai alkalmazások szempontjából is hasznosak és érdekesek.

A könyv tizenegy fejezetre és függelékre tagolódik. Az első három fejezet a relativisztikus kinematikát, dinamikát és a vákuumbeli relativisztikus elektrodinamikát tárgyalja. A dinamika keretében a pontrendszerek alaptörvényeit is megadja, és itt kerül sor az ütközések, valamint a rakétamozgás egyszerű relativisztikus leírására.

A következő két fejezet az egyenletesen mozgó testek elektrodinamikájával, és alkalmazásokkal foglalkozik. Példaként megemlítjük e fejezetek néhány pontját: Szigetelőben egyenletesen mozgó ponttöltés tere; A Cserenkov-sugárzás; Hullámok mozgó szigetelőben; Elektromos dipól-sugárzás mozgó szigetelőben; Mágneses térben mozgó vezetők; Hullámok visszaverődése mozgó vezetők; Hullámok szóródása mozgó hengeren; s. i. t. Ezekben az alkalmazásjellegű feladatokban a téreloszások transzformációs képleteire találunk jó példákat.

A hatodik fejezet az elektromágneses tér közegre kifejtett erőhatásával és az energiájával foglalkozik. Az erőre számos érdekes példa szerepel. Pl. a sugárnyomás mozgó tükkörre. Itt kerül sor a Maxwell-féle feszültségek és az energia-impulzus-tenzor bevezetésére. Tárgyalja az Abraham- és a Minkowski-tenzor körüli vitát és a Lahoz-Walker-kísérletet, amely alacsony frekvencián az Abraham-tenzor mellett szól.

Az utolsó öt fejezet a gyorsuló vonatkoztatási rendszerekkel és a gravitációs tér relativitáselméletével, az ún. általános relativitáselmélettel foglalkozik. Mivel elsősorban mérnökök és az alkalmazások számára íródott a könyv, ezért a hosszadalmas számításokat megelőzi a szerző. Ehelyett itt is sok érdekes fizikai probléma tárgyalására kerül sor. Például a tizedik fejezet ilyen kérdéseket is tartalmaz: Forgó vezető gömb homogén mágneses térben; Forgó permanens mágnes; Hullámok szóródása forgó vezető (és szigetelő) hengeren; Fényvisszaverődés rezgő tükkör; s. i. t.

A gravitáció elméletéről a részletes számításoktól mentes jó összefoglalás található a nyolcadik fejezetben. Különösen olyanoknak ajánlható e rész, akik a témakör részleteivel nem akarnak megismerkedni, de az elmélet eredményeiről és kozmológiai következtetéseiről képet akarnak kapni.

A könyv a relativitáselmélet és alkalmazásai iránt érdeklődő mérnökök részére íródott elsősorban, de megleően ajánlható fizika tanárok számára is. Sőt, alapját képezheti ilyen témakörű speciális előadásnak.

Dr. Nagy Károly

**J. M. Bowman (ed.): Molecular Collision Dynamics, Topics in Current Physics
Springer-Verlag, Berlin 1983.**

Az atom-molekula, molekula-molekula szóródási folyamatok vizsgálatában az utóbbi néhány évben elért eredményeket, illetve korábbi eredmények új megközelítését ismerheti meg az olvasó e könyv öt fejezetéből, a téma kiváló művelőinek segítségével.

A nemreaktív, elektronikus adiabatikus atom-molekula ütközések elmélete bár jól kidolgozott, numerikus nehézségek miatt a konkrét számításokban különböző közelítő módszereket alkalmaznak. A szóródás kvantummechanikai feladatának megoldására kidolgozott „csatolt állapotok” módszerét, használatának problémáit, és eredményeinek perturbációs számítással történő lehetséges javításait mutatja be Secrest a könyv második fejezetében, tömören, az elveket hangsúlyozva. A módszert meglehetősen nehéz alkalmazni a többatomos molekulák esetében, mivel ezeket az ütközés nagyszámú különböző energiaállapotba gerjesztheti. A többatomos molekulák ütközési folyamatait viszonylag egyszerűen elemezhetők a kváziklasszikus trajektória elmélettel. A könyv harmadik fejezetét adja e módszer leírása, a kezdettől a jelenlegi legmodernebb állapotig. A szerző, Schatz, számítási eredmények, és a számítások menetét, logikáját tükröző „folyamatábrák” bemutatásával segíti az elmélet megértését. A negyedik fejezetben a forgási szempontból rugalmatlan, atom-kétatomos molekula ütközések szóródási hatáskeresztmetszet szerkezeteinek elméleti értelmezését, kísérleti megfigyelésének módszereit és lehetőségeit elemzi Schinke és Bowman. Az olvasó mindeddig csak egy rövid áttekintést találhatott a reaktív ütközések kvantumelméletéről, a bevezető, első fejezetben. Baer munkájából (ötödik fejezet) részleteiben is megismerkedhet az elektronikus nem adiabatikus, kollinear, reaktív atom-molekula ütközések kvantumelméletével.

A könyv áttanulmányozása hasznos lehet mindazoknak a kutatóknak, a téma szakértőin kívül, akik a molekulák nagy amplitúdójú belső mozgásait vizsgálják, hiszen az általuk használt matematikai formalizmus, a megoldandó fizikai probléma, sok részletben azonos, megismétlődik az ütközési folyamatok leírásában. Ajánljuk ezt a könyvet azoknak, akik a kémiai reakciók lényegét, „miért”-jét szeretnék megérteni, hiszen az atom-molekula, molekula-molekula ütközések vizsgálata a kémiai reakciók dinamikájának mélyebb megértéséhez vezet.

Sz. V.

**Frances Bauer—Octavio Betancourt—Paul Garabedian:
Magnetohydrodynamic Equilibrium and Stability of Stellarators.
Springer-Verlag, Berlin.**

A termonukleáris reaktorok megvalósítására vonatkozó kutatások évtizedek óta változatlan intenzitással folynak szerte a világon. A plazma fűtésén kívül a legfontosabb megoldandó feladat a plazma összetartása. A legtöbb termonukleáris berendezésben a magas hőmérsékletű plazmát toroidális mágneses felületek tartják össze. A radiális részecske-kilépést vagy „járulékos” árammal (TOKAMAK), vagy helikális tekercsekkel (STELLARATOR) igyekeznek megakadályozni.

A magnetohidrodinamikai egyensúly, stabilitás és transzport kérdéseiről nagyszámú dolgozat és szakkönyv látott napvilágot. A legtöbbjük szerzője valamilyen „kis” paraméter szerinti sorfejtéssel operál, illetve a magnetohidrodinamika klasszikus variációs elvére alapozva ismerteti valamilyen számítástechnikai módszert.

Ez utóbbi módszer egyik, újszerű változata a kötet tartalma. A szerzők részletesen ismertetik az erős mágneses térrel a STELLARATOR-ban összetartott, magas hőmérsékletű (de ideális) plazma egyensúlyát és stabilitását leíró számítástechnikai módszereket, amelyeket az utóbbi években a Wisconsin Egyetemen, az Oak Ridge Nemzeti Laboratóriumban és a Princeton-i Plazmafizikai Laboratóriumban dolgoztak ki. A szerzők módszerének újdonsága ún. flux-koordináták bevezetése, amelyeknek a segítségével jobban áttekinthetők az egyensúlyi és az energia-eloszlási tartományok struktúrája — legalábbis — ideális plazmában.

A számítástechnikai programok leírása előtt a szerzők tömören ismertetik az alkalmazott módszer matematikai alapjait: a variációs elv, a véges differenciák módszere, nem-lineáris stabilitás, a Mercier-féle kritérium, transzportfolyamatok, kísérleti eredmények STELLARATOR-ral. Ez az elméleti bevezetés azonban a kötetnek alig egyharmadát teszi ki. A könyv további, nagyobbik részének tartalma: a Wisconsin Egyetemen kidolgozott WISTOR—U matematikai módszer, az Oak Ridge Nemzeti Laboratórium AFT—1 kísérleti módszere, a Princeton-i Plazmafizikai Laboratórium HELIAC-kísérlete. Az utolsó négy fejezetben a FORTRAN-programnak a feladathoz „illesztett” ún. BETA kódját ismerheti meg az olvasó.

A kötet a szerzők korábbi, hasonló témájú könyvének (F. Bauer—O. Betancourt—P. Garabedian: *A Computational Method in Plasma Physics*, Springer Series in Computational Physics, Springer-Verlag, 1978) a kiegészítése, illetve folytatása. Az előző könyv közreadása óta elért számítástechnikai eredmények valóban figyelemre méltóak.

Szabó János

**A. I. Kitaigorodsky: *Mixed Crystals*.
Springer Series in Solid-State Sciences 33.
Springer-Verlag, Berlin 1984.**

A Springer Kiadó kitűnő szilárdtestfizikai sorozata újabb értékes taggal bővült. A szerző a szokatlan címmel kifejezésre akarja juttatni, hogy könyvében a kristályos anyagok széles körét egységes szempontok szerint lehet tárgyalni, ha a kevert szó mind a különböző molekulákból felépített kristályok, mind a különböző struktúrájú kristályok keverékét fedi. A vezérelv amelyik végigvonul a könyvön a szoros illeszkedés elve. Ez lehetővé teszi a fémek, szervetlen és szerves kristályok, polimerek valamint biopolimerek szerkezetének egységes tárgyalását.

A mintegy 400 oldalas könyv 15 fejezetre oszlik. Az első fejezet bevezetése után a másodikban, amely a Fázisdiagramok címet viseli a binér rendszerek fázis egyensúlyát tárgyalja a szerző, kitérve a fázisdiagramok kísérleti felvételére. A részecske illeszkedés egy kristályban c. harmadik fejezetben kristályszerkezeti alapokat nyújt. A szilárdoldat szabadenergiája c. negyedik fejezetben bemutatja, hogy a szerkezet kialakulása szempontjából a lényeges tényező a szomszéd részecskék kölcsönhatása és a szoros illeszkedés elve ezt a kölcsönhatást takarja. A heterofázisú rendszerek c. ötödik fejezet röviden tárgyalja a heterofázisú rendszerek struktúrájának általános törvényszerűségeit. Az általános részt a Röntgenszórás c. hatodik fejezet zárja.

A további fejezetek: 7. Intermetallikus vegyületek. 8. Fémek szilárd oldatai. 9. Szervetlen szilárd oldatok. 10. Szubsztitúciós szerves szilárd oldatok kialakulásának feltételei. 11. Rend a szerves szilárd oldatokban. 12. Szerves szilárd oldatok szerkezete. 13. Komplexek. 14. Polimerek. 15. Biopolimerek. E fejezetekben a szerző bemutatja az általános részben tárgyalt alkalmazását a különféle anyagokra.

A könyv hasznos ismereteket nyújt szilárdtestfizikusoknak, vegyészeknek, geológusoknak, biológusoknak, kohászoknak, technológusoknak. Haszonnal forgathatják a könyvet a fenti szakok egyetemi hallgatói is, mert az anyagok sokaságát átfogó tárgyalásmódjával a szűk specializáció helyett inkább a látókört bővíti.

V. R.

**G. Bauer, F. Kudar and H. Heinrich (eds):
Two-Dimensional Systems, Heterostructures and Superlattices
Springer Series in Solid-State Sciences 53.
Springer-Verlag, Berlin 1984.**

A kötet az ausztriai Mauterndorf-ban 1984 elején megrendezett téli iskola előadásainak anyagát tartalmazza. Az előadások elsősorban a félvezető heterostrukturákkal, inverziós rétegekkel és szuperrácsokkal foglalkoztak, de igen széles perspektívába állítva a területet. Az olvasó jó összefoglalókat találhat a kétdimenziós, vagy közel kétdimenziós elektronrendszerek tulajdonságairól. Így részletesen van szó a kvantáló mágneses tér szerepéről, s külön fejezet foglalkozik a kvantált Hall-effektussal, ahol többek között von Klitzing és Laughlin cikkei is szerepelnek. De ugyanígy szó van a heterostruktúrák előállításáról is, vagy a szuperrácsok készítéséről, mint az ottani elektronállapotok elméleti, vagy kísérleti vizsgálatáról.

A kötet jó áttekintést ad erről a gyorsan fejlődő területről, s ezért nemcsak félvezető-fizikusoknak ajánlható, hanem mindazoknak, akik kicsit szélesebben akarnak tájékozódni a kétdimenziós elektronrendszerek tulajdonságairól.

Sólyom Jenő

**Colin A. Ronan: The Cambridge Illustrated History of World's Science
Cambridge University Press—Newnes Books, Cambridge, England 1983.**

Colin A. Ronan az Angol Királyi Csillagászati Társaság tagja (FRAS) csillagászati kutatásaiért a csillagászok, a távcső korai fejlődéstörténetet feltáró bűvarkodásáért a csillagász- és tudománytörténészek körében ismert. Neve szerepel az Encyclopedia Britannica és az Interdisciplinary Science Review cikkirői között is. Az interdiszciplináris tevékenységének kimagasló, Európa-szerte nagy visszhangot keltő állomása volt az a munkája, melynek során a Joseph Needham vezette kutatócsoport „Science and Civilisation in China” (1954) nagy monográfiájának rövidített formában és egyszerűbb nyelven írott kiadását elkészítette, és megjelentek a „The Shorter Science and Civilisation in China” első kötetei (1978—80). Needham és munkatársai úttörő munkája abban áll, hogy a kínai nyelv ismeretében, tehát személyesen, első kézből ismerkedve a forrásmunkákkal kísérlik meg feltárni a kínai kultúra múltját és közvetíteni a tanulságokat az ún. európai kultúra számára. Ennek az alábbiakban is jelentős szerepe lesz.

Ha az ismertetendő mű címét megpróbáljuk szó szerint lefordítani, valami a megoldásban áldozatul esik. Hogy „a világ illusztrált tudománytörténete” vagy „a tudomány illusztrált világtörténete” megoldások melyikét választjuk, az már amolyan fordítói hitvallásféle. Maga a mű inkább azt sugallja, hogy a lakott világnak a tudományáról van szó, amelynek bölcsőjét mindenütt ringatták, ahol csak éltek emberek. A tudomány azzá nőni, ami most, csak azáltal tudott, hogy a kisarjadó tudománypalánták nemcsak az emberi generációk között örökösdéssel gyarapodtak, hanem a történelem során — ha eleinte mégoly elenyésző mértékben is — egymással kölcsönhatásban is voltak. Ez a fajta gyarapodás indokolja az egyetemes történeti megközelítést, aminek fő előnye, hogy összehasonlíthatja a tudomány egyes társadalmakban játszott szerepét is. Ezért úgy tűnik a legjobb magyar cím „Képes egyetemes tudománytörténet” lenne. Ehhez azonban a „Képes” és az „egyetemes” jelzők helyes értelmét is be kell határolni. A Szerző és a Kiadó fennen hangoztatja, a mű illusztrált jellegét. Ezzel azt kívánja szembeszökővé tenni, hogy a kötet páratlanul gazdag képekben, metszetekben, rajzokban, melyeket — valljuk be — egyes tudományágak kutatói vagy ismerői eddig talán még sohasem láthattak. Az illusztrációk játszott szerep a műben összemérhető a szöveggel, mert nemcsak a vizuális élményt, hanem a magyarázatot, a megértést, a dokumentációt is szolgálja. Ami pedig az „egyetemes” jelzőt illeti, nemcsak a tudomány eredetének minden társadalmakra kiterjedő általánossága, hanem a természettudomány ágainak méltó egymás mellé állítása értelmében is jogosan használható e művel kapcsolatban. Nem szorítja ugyanis méltatlanul háttérbe a kémiai—biológiai ágakat a csillagászati—fizikaihoz képest, hanem azt a mértéktartó univerzális szemléletet árasztja szinte kimondatlan természetességgel, hogy a fizika, ill. a csillagászat, majd a kémia és a biológia is csak egy a természettudomány ágai közül és ezzel a műfaj nincs kimerítve.

Az 543 oldalas könyvet kézben tartva valahogy érzékelteni kellene ennek az ambíciózus körképnek a földrajzi és kronológiai felbontását. Nem tudunk jobbat az arányok közelítő bemutatásánál és kevés hozzájuk fűzött kommentárnál.

„A tudomány eredete” (kb. 10%). Ebben a fejezetben indul a mágiától az igazi tudományig az elemzés, a „primitív” civilizációk útja a természeti jelenségekre vonatkozó tudás, mint a hatalom, az emberi megélhetést és túlélést meghatározó eszköz felismerése felé. Kiválglik, hogy a tudományt nemcsak a haszonelvűség hajtja, hanem „A görög tudomány” — kb. 12% — fejezetben kiderül, hogy a megismerhető kíváncsisága, rendszerteremtő sikere, a megértés élménye csakúgy elengedhetetlen mozgatóerő. A kínai tudomány (~11%), a hindu és az indiai tudomány (~4%) az arab tudomány (~7%) fejezeteiben Szerző ugyanolyan hitelességgel tájékoztat, mintha csak a görögökről volna szó. Ritkán van alkalmunk arra, hogy a szerzők, akik műveiket átfogó tudománytörténetnek szánják, ténylegesen ki tudnának térni a nem-európai, a nem-mediterrán, vagy nem mezopotámiai kultúrák érdemi bemutatására. Ronan könyvének ezek talán a legérdekesebb fejezetei.

Az arab tudományt bemutató fejezet (~7%) lényeges újdonsága, hogy túllép az arabok közvetítő szerepének felszínén, feltárja önálló alkotásait az arab tudománynak és beágyazza az egyetemes tudománytörténet szerves fejlődési folyamatába.

A rómaiak tudománya és a középkori tudomány (~4%), a renaissancetól a technikai forradalom terjedő kor (~13%) fejezeteiben szétfoszlik a sötét középkor kényelmes — mert semmitmondó — mítosza, kiderül, hogy mégis történt valami fejlődés a termelő eszközök és erők terén, ami megszülte az ipar, a polgárság csíráit, kieroszakolta a hasznos ismeretek értékének emelkedését, felkeltette a kíváncsiságot, a sikerek a gyakorlati életben pedig rávették az embereket a következtetések levonására az elvi oldalon is. Ronan érzékelteni tudja azt a folyamatot, amely a gondolkodás számára a tapasztalatszerzés fontosságát és lehetőségét előtérbe állítja az ókori görög örökségből nem a tekintélyre merevített megállapításokat, hanem a vizsgálódásra a cselekvésre és az újragondolásra való késztetést olvassa ki.

A XVII—XVIII. sz. tudománya (~14%) az „új tudomány” kibontakozásának intellektuális feszültségét, az első betetőzés, az elvi és alkalmazásbeli siker felé vezető utat vázolja fel, méltó részt adva a kémiai és biológia felsorakozására az „új tudomány” égisze alá. Cseppet sem sajnáljuk, hogy a könyv két utolsó fejezete, a XIX. sz. tudománya (~10%) és a XX. századi tudomány áttekintése (~8%) egyre szűkebb marokkal mér. Bizonyára számít arra, hogy erről az olvasók többet tudnak és már maguk öntevékenyen beillesztik rendszerébe a folytatást, másfelől egyenesen kilátástalan vállalkozás lenne az „új tudomány” egyre sokasodó új ágairól érdemben szólni — ily röviden, vagy akárcsak néhányszor ekkora terjedelemben. Ezen a téren mások már sok babért arattak.

Ronan könyve bizonyára nagy élmény és az ismeretek gazdag tárháza lesz mind a természet-tudományok művelőinek és oktatóinak, mind történészeknek és filozófusoknak. Szerzőt, kiadót komoly elismerés illeti a kötetért.

Abonyi Iván

**Herbert Pietschmann: Weak Interactions — Formulae, Results and Derivations
Springer-Verlag, Wien, New York, 1983.**

A részecskefizika egyik kimagasló teljesítménye a gyenge és elektromágneses kölcsönhatások egységes elméletének megalkotása. Ez nemcsak a különféle és rendkívül szerteágazó gyenge folyamatokat képes igen nagy pontossággal leírni — a bétabomlástól a bűvös részecskék fizikájáig —, de olyan távoli jelenségeket is egybe tud kapcsolni, mint az elektromágneses sugárzás és a tértükrözési szimmetria megsérülése. Az elmélet sikeresen megjósolta a semleges gyenge áramot majd a gyenge kölcsönhatás erőter kvantumait, a szokatlanul nagy tömegű közvetítő bozonokat. Ez utóbbiak nem régen történt kimutatásával az elektro-gyenge kölcsönhatás elmélete bizonyos értelemben lezárt fejezetnek tekinthető, és az említett sikereknek köszönhetően joggal érdemelte ki a Standard Model minősítést.

Herbert Pietschmann, a bécsi egyetem elméleti fizika professzora a gyenge kölcsönhatások területén több évtizedes tapasztalattal rendelkezik. Könyve a Standard Model eredményeit foglalja össze — és pedig igen eredeti módon. Az első rész kézikönyvnek használható, ugyanis az elmélet legfontosabb képleteit, eredményeit itt csupán felsorolja. Ezt egészíti ki az egyes fejezetekhez rendelt Mellékletek (Addendumok) formájában az eredmények részletes levezetése a közbelső lépések szöveges magyarázatával.

A könyv felöleli a gyenge kölcsönhatás leglényegesebb fejezeit — az időtükrözési szimmetria megsérülésének kivételével. Az anyagot néhány általános, gyakran használt matematikai egyenlet vezeti be, majd a Dirac-egyenlet elemzésére tér rá. Ezt követi a téroperátorok és invariáns függvények áttekintése, a hatáskeresztmetszet és élettartam kiszámítása. Külön fejezet foglalkozik a fázistér kiintegrálásának technikájával. Így jut el a Standard Model leírásához, az ennek megfelelő Addendum pedig részletesen ismerteti azokat az elveket, problémákat és természetesen ez utóbbiak megoldását, amelyek szinte szükségszerűen vezettek el a Model végső alakjához.

A könyv hátralevő részében az alkalmazások egész sora következik, felölelve gyakorlatilag a gyenge kölcsönhatások egész területét — a már említett CP-sértés témaköre az egyetlen jelentős kivétel ez alól. A leptonok bomlásának leírását követik a hadronok felleptonikus bomlásai, az áram-algebra, valamint a hiperonok nemleptonikus bomlásai. Három fejezet foglalkozik a neutrínók szóráásával, kettő pedig a közvetítő bozonok bomlásaival. A bő anyagot a hadronok kvantumszámainak összegezése, illetve három, technikai részletkérdéssel foglalkozó függelék zárja le.

A könyvet elsősorban azok használhatják, akik az elektro-gyenge kölcsönhatást alkalmazni kívánják. Igen értékes például a kísérleti fizikus részére, hogy a bomlásokban keletkező részecskék spektruma, polarizáltsága rendszerezetten közvetlenül rendelkezésre áll akár a kísérletek tervezésénél, akár az adatok feldolgozásánál. A könyv referenciául szolgálhat mindazok részére, akik vagy saját vagy mások eredményét kívánják ellenőrizni az elektro-gyenge folyamatok számításában. A munka egyik legnagyobb értéke ugyanis, hogy a szerző minden képletet maga ellenőrzött és vezetett le, és így azok egzaktágát a terület egy kiváló ismerője személyesen garantálja.

Végül a levezetésekben megmutatkozó pedagógia azok részére is vonzóvá teszi a könyvet, akik a gyenge kölcsönhatás elméletét részleteiben is meg akarják ismerni, akiket nemcsak a vég-eredmény érdekel, hanem az azok mögött meghúzódó gondolatok, összefüggések. Herbert Pietschmann professzor, akit a magyar részecskefizikusok mint a „Háromszög Szemináriumok” egyik alapító tagját és máig is egyik legaktívabb szervezőjét ismerik, könyvének precizitásával és élvezetes felépítésével teljes mértékben igazolta nemzetközileg elismert hírnevét.

Nagy Elemér

**H. Oechsner (ed.): Thin Film and Depth Profile Analysis
Springer-Verlag, Berlin 1984.**

A kötet, a Topics in Current Physics 37. kötete, azon szeminárium sorozatnak az anyagából készült, amelyet a Bad Honnef-i „Physikzentrum”-ban, Bonn mellett tartottak. A szeminárium célja az volt, hogy — elsősorban a porlasztást alkalmazó — vékonyréteg vizsgálati módszerek mai fejlettségét, ma is meglevő kvantifikációs gondjait összefoglalja.

A cikkek három kategóriába sorolhatók: 1. a különféle vékonyréteg vizsgálati módszerek összehasonlítását, 2. a SIMS, AES, XPS és egyes változatainak „elkötelezett” ismertetését és 3. a kvantifikáció lehetőségeit, elvi határait bemutató tanulmányok.

A miniatürizáció igényei egyre feszítőbbek az anyagvizsgálati feladatok megoldásában. Valamennyi módszer élesíti az eljárásait, és támogatja a lehetőségeinek határait. Ezért megszokott az, hogy pl. az összehasonlító táblázatokat ki-ki úgy állítja össze, hogy a „saját” módszer előnyei kidomborodjanak — és mellőzi azon táblázatokat, amelyek hátrányos fényben tüntetnek fel a kiemeltet.

E könyv — ebből a szempontból — elkötelezettnek indul a SIMS, Auger és változataik (SNMS, Secondary Neutral Mass Spectrometry) iránt. Ilyenként azonban világos, jó színvonalú és megmutatja a legmodernebb irányokat.

A cikkek harmadik csoportja mintha teljesen más „tábor” — az „őszinték” — által íródott volna: ezek a cikkek pontosan és tárgyilagosan — kissé üzlet-ellenesen is — bemutatják azokat a gondokat, amelyek a művi hatásokból, kvantifikálási korlátokból származnak. A szerkesztő, H. Oechsner professzor a bevezetőben őszintén megírja: nem bánja ezt a kettősséget, és azt, hogy az egyes szerzők eltérő következtetésre jutnak, a téma bonyolultságának számlájára írja.

A SIMS és AES mélységei, teljesítőképessége iránt érdeklődő olvasó valóban objektív és igaz összképet kap a porlasztásos rétegtárolító módszerekről.

Gyulai József

**Landolt—Börnstein: Radical Reaction Rates in Liquids. Carbon-centered Radicals II.
New Series. Group II. Volume 13, Subvolume b.
Springer-Verlag, 1984.**

A Landolt—Börnstein sorozat nemzedékek kézikönyve. Ennek a kötetnek szerkesztője H. Fischer, összeállítója K.-D. Asmus és M. Bonifacich. A spektroszkópiai fizikai—kémiai mérési módszerek fejlődése lehetővé tették, hogy a kémiai reakciókban fellépő rövid ideig tartó közbenső állapotokat, szerkezetüket, reakciójukat és kinetikájukat tanulmányozhassák. A termikus, foto- és sugárkémiai folyamatokban szerepet játszó szabad gyökök, ill. ezek reakciói a kutatásoknak egyik legaktívabb ágát képezik. Az idevonatkozó anyagok összegyűjtése, rendszerezése ennek a kötetnek a célkitűzése, anyagát a szabad gyököknek folyadék közegben végbemenő reakcióinak sebesség-állandói és más kinetikus paraméterei képezik. A könyv egyes fejezetei a szabad gyökök individualis típusaival, mint a szénközpontú, nitrogén központú gyökökkel, nitroxil gyökökkel, oxigénközpontú gyökökkel és más heteroatomokra centrált gyökökkel foglalkoznak. Ezek a részek főleg irreverzibilis reakciókat tárgyalnak. Ezen kívül vannak fejezetek, amelyek elektron és proton transfer folyamatokat és ezek egyensúlyát tartalmazzák. Egy fejezetben a biradikálok szerepelnek. A kötet fő tárgya a kiterjedt reakciók abszolút sebességi állandói. A sebességi konstans adatok három csoportra vannak osztva: abszolút sebességi állandók, relatív sebességi állandók és izotop effektusok. Ez utóbbiak nemcsak a sima izotop effektusokra vonatkoznak, hanem az izotop effektusokban szerepet játszó átlagos relatív sebességi állandókra is. A kötet szerkesztői arra is vigyáztak, hogy a keresett adatokat viszonylag gyorsan meg lehessen találni. Az összegyűjtött adatok zömmel 1981 előttről valók, de már találhatók 1983-as adatok is.

T. Gy.

**Landolt—Börnstein: Semiconductors, Subvolume d,
Technology of III—V, II—VI and Non-Tetrahedrally Bonded Compounds 429 oldal, 461 ábra.**

A III/17-es kötetek először adnak részletes és teljes képet a félvezetőről ilyen átfogó formában. A félvezetők fizika tulajdonságairól hét, a technológiáról két kötet szól. Ez utóbbiakhoz tartozik III/17 d kötet is, amelyben a III—V és II—VI vegyületekről, valamint néhány gyakorlati alkalmazásra lelt nem-tetraéderesen kötött félvezetőről találunk technológiai adatokat. Az iménti anyagcsoportokról szóló ismereteket négy fő téma köré gyűjtötték össze. Az elsőbe fázisdiagramok és

termodinamikai paraméterek, a másodikba az alapanyag előállítási és tisztítási kérdésein kívül a kristálynövesztési módszerek, a harmadikba a kristályok tulajdonságainak minősítése (pl. szennyezések, hibák stb.), és végül a negyedikbe az eszközkészítés technológiája került. A periódusos rendszer III. és V. oszlopa elemeinek kombinálásával olyan változatos tulajdonságú vegyületek nyerhetők, amelyek bizonyos tekintetben felülmúlják a szilíciumot. A GaAs nagy elektron mozgékonyasága előnyös a mikrohullámú eszközökben, az InSb kis tiltotsáv szélessége alkalmas az infravörös sugárzás detektálására. Bár ezen vegyületek technológiája általában bonyolultabb, mint a Si vagy Ge elemeké, de egyes eszközök mint pl. a fényemittáló diódák és Gunn diódák csak vegyület félvezetőkből állíthatók elő. A könyvben szereplő második nagy anyagcsoport a II—VI típusú vegyületek, amelyek közt széles és keskeny tiltotsávú félvezetők egyaránt találhatók. A nem tetraéderezen kötött félvezetők fejezetében a IV—VI vegyületekről, a Hg_2 -ről és a szeléniumról esik szó.

A technológiák leírását nem olyan könnyű táblázatokba foglalni, mint a fizikai paramétereket, ezért e kötet több szöveget tartalmaz, mint az előzőek. A könyv végén nagy számú ábra egészíti ki a táblázatok adatait. Ahol szükséges, irodalmi hivatkozásokat is találunk. Ez a kötet gyakorlati jelentősége folytán nemcsak a kutatólaboratóriumokban, hanem az ipari intézetekben is hasznos segítőtárs lehet.

K. L.

**Landolt—Börnstein: Semiconductors, Subvolume g.
Physics of Non-Tetrahedrally Bonded Binary Compounds III. 666 oldal, 1160 ábra.**

A félvezetőkről szóló legújabb III/17 g kötet folytatja és egyben befejezi a két elemből álló vegyület félvezetők fizikai tulajdonságainak leírását. Ebben a kötetben a bór vegyületek, az átmeneti és ritkaföldfém félvezető vegyületek adatait találjuk. A bór vegyületek, különösen a boridok rendkívül széles szerkezeti és összetételi változatosságot mutatnak a bór atom külső elektronhéjának $2s^2p^1$ konfigurációja következtében. Bár a könyv elsősorban a félvezetőkkal foglalkozik, sok esetben nem lehet egyértelműen szétválasztani a félvezető és a fém bór vegyületeket, így ez utóbbiak is bekerültek a kötetbe. Az egyes vegyületek fizikai tulajdonságait — attól függően, hogy milyen részletességgel vizsgálták azokat — több alfejezetre osztották. A legtöbbet tanulmányozott átmenetifém-oxidok esetében a következő alcímeket találjuk: kristályszerkezet, elektronszerkezet, szennyező- és hibaállapotok, rács tulajdonságok, transzportjelenségek, optikai tulajdonságok és az egyebek között termikus, mágneses stb. paraméterek. Fellelhetjük itt azokat a spinel szerkezetű átmenetifém-oxidokat, illetve ritkaföldfém vegyületeket, melyek mágneses tulajdonságai legalább olyan fontosak, mint félvezető tulajdonságaik.

A gazdag hivatkozásjegyzék tanúsága szerint az adatokat 1983-ig tekintették át. A kötet végén bőségesen találunk ábrákat az anyagok kristály- és sáv szerkezetéről, transzporttulajdonságairól és más olyan jelenségekről, melyek egyszerű táblázatokba nem foglalhatók. A félvezetők itt tárgyalt csoportjával foglalkozó szakemberek e kötet segítségével teljes képet kaphatnak az általuk vizsgált anyagokról.

K. L.

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó és Nyomda főigazgatója
Műszaki szerkesztő: Sándor István
A kézirat a nyomdába érkezett: 1985. június 15. — Terjedelem: 9,45 (A/5) ív
86-2496 — Szegedi Nyomda, Szeged — F. v.: Surányi Tibor igazgató

Műszaki szerkesztő: Sándor István
TUDOMÁNYOS KÖNYVTÁR
KÖNYVTÁR

TARTALOMJEGYZÉK

SZUPERSZIMMETRIÁK ÉS SZUPERGRAVITÁCIÓ

<i>Huszdár Miklós</i> : No go tételek a belső szimmetriák és a Poincaré-csoport egyesítésére	93
<i>Gálfi László</i> : Szuperszimmetrikus Lagrange-függvények	105
<i>Gálfi László</i> : Spontán sértett szuperszimmetria	115
<i>Szlachányi Kornél</i> : Renormálás és ultraibolya végeesség. A Nicolai leképezés és stochasztikus interpretációja	121
<i>Nagy Tibor</i> : Alacsonyenergiás szuperszimmetrikus modellek	133
<i>Vecsernyés Péter</i> : Szuperszimmetrikus nagy egyesítések	145
<i>Lukács Béla</i> : Kozmológiai korlátok a szuperszimmetria sérülésére	157
<i>Szabó László</i> : A szupertérítő geometriájának alapjai	171

AZ IUPAP HÍREI

<i>Kiss Dezső</i> : A fizikusok nemzetközi szervezete, az IUPAP	179
---	-----

KÖNYVISMERTETÉS

<i>Roland Glowinski</i> : Numerical Methods for Nonlinear Variational Problems	185
<i>A. Benninghoven, J. Okano, R. Shimizu, H. W. Werner</i> : Secondary Ion Mass Spectrometry SIMS III	185
<i>T. Matsubara and A. Kotani</i> : Superconductivity in Magnetic and Exotic Materials	186
<i>Brian Davies</i> : Integraltranszformációk és alkalmazásai	187
<i>Landolt—Börnstein</i> : Elastic, Piezoelectric, Pyroelectric Piezooptic, Electrooptic Constants and Nonlinear Dielectric Susceptibilities of Crystals	188
<i>W. Eisenmenger, K. Lassmann, S. Döttinger</i> : Phonon Scattering in Condensed Matter	188
<i>D. H. Auston and K. B. Eiseenthal</i> : Ultrafast Phenomena IV	188
<i>D. Bäurele</i> : Laser Processing and Diagnostic	189
<i>E. E. Nikitin, S. Ya. Umanskii</i> : Theory of Slow Atomic Collisions	190
<i>Dombrádi Zsolt—Fényes Tibor</i> : In-Beam Nuclear Spectroscopy	191
<i>Sallie L., Baliunas and Lee Hartmann</i> : Cool Stars, Stellar Systems and the Sun	191
<i>G. Schmall and D. Rudolph</i> : X-Ray Microscopy	192
<i>H. Ulrich and G. J. B. Probst</i> : Self-Organisation and Management of Social Systems	193
<i>Y. Kuramoto</i> : Chaos and Statistical Mechanics	194
<i>J. Van Bladel</i> : Relativity and Engineering	194
<i>J. M. Bowman</i> : Molecular Collision Dynamics	195
<i>Frances Bauer—Octavio Betancourt—Paul Garabedian</i> : Magnetohydrodynamic Equilibrium and Stability of Stellarators	195
<i>A. I. Kitaigorodsky</i> : Mixed Crystals	196
<i>G. Bauer, F. Kudar and H. Heinrich</i> : Two-Dimensional Systems, Heterostructures and Superlattices	196
<i>Colin A. Roman</i> : The Cambridge Illustrated History of World's Science	197
<i>Herbert Pietschmann</i> : Weak Interactions — Formulae, Results and Derivations	198
<i>H. Oechsner</i> : Thin Film and Depth Profile Analysis	199
<i>Landolt—Börnstein</i> : Radical Reaction Rates in Liquids	199
<i>Landolt—Börnstein</i> : Semiconductors, Subvolume d	199
<i>Landolt—Börnstein</i> : Semiconductors, Subvolume g	200

307.226

IV. 9

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

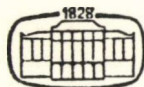
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSEVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXIV. KÖTET

3. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1986

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet
1444 Budapest VIII., Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 120 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 388), külföldi megrendelések a KULTURA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levelezéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölgék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

FÁZISÁTALAKULÁSOK ÉS KORRELÁCIÓK FRUSZTRÁLT ISING-MODELLEKBEN*

SÜTŐ ANDRÁS

MTA Központi Kutató Intézet, Budapest

TARTALOM

I. Bevezetés	201
II. Versengő kölcsönhatású rendszerek, frusztráció	204
III. Peierls-érvelés Ising frusztrációs modellekre	209
0. Peierls-érvelés Ising ferromágnesre	213
1. Definíciók és jelölések; az eredmények ismertetése	215
2. Az 1. Tétel bizonyítása	221
3. A 2. Tétel bizonyítása	223
4. A Longa—Oles' modell és a 3. Tétel bizonyítása	232
5. A Peierls-érvelés kiterjesztése egyéb rétegesen frusztrált modellekre?	239
IV. A szabadenergia és a korrelációs függvények analitikus tulajdonságai Ising frusztrációs-modellekben	240
1. Az alaplemma	242
2. Magas hőmérsékleti tartomány Ising modellekben, méhsejt rácson	245
3. Az alaplemma egy hasznos általánosítása	247
4. Főpélda a 3. Lemmához: Ising modellek	252
5. Frusztrációs modellek a Kagomé rácson	255
6. Frusztrációs modellek a négyzetrácsra	259
7. „Szuperfrusztráció”	267
V. Összefoglalás	271
Köszönetnyilvánítás	271
Irodalom	271

I. BEVEZETÉS

A jelen disszertáció frusztrált Ising modellek egyensúlyi állapotainak matematikai leírásával foglalkozik, különös tekintettel arra a szerepre, amelyet a frusztráció játszik az ezen modellekben lezajló fázisátalakulásokban.

A vizsgálandó rendszerek megadhatók a

$$H(s) = - \sum_{\langle xy \rangle} J_{xy} s(x) s(y) \quad (I.1)$$

Hamilton függvénnyel. Itt $s(x) = \pm 1$ az úgynevezett Ising-spin egy rác x pontjában, $\langle xy \rangle$ a rác első szomszéd párait jelöli, J_{xy} valós állandó pedig a kötés az x és y -beli spinek között. Nulla hőmérsékleten a spinek olyan konfigurációi fordulhatnak elő, amelyek minimalizálják a $H(s)$ függvényt: az s^0 alapállapotban

$$H(s^0) \leq H(s) \quad (I.2)$$

* Érkezett 1984. márc. 26. Kandidátusi értekezés.

teljesül minden s -re. Az alapállapot konfiguráció, az alapállapotok száma és a minimális energia értéke függ a J kölcsönhatástól. A versengésmentes kölcsönhatások tipikus példája a ferromágneses potenciál: $J_{xy} > 0$ minden $\langle xy \rangle$ -ra. Ebben az esetben $s^0 \equiv +1$ vagy $s^0 \equiv -1$, és $H(s^0) = - \sum_{\langle xy \rangle} |J_{xy}|$, azaz külön-külön minden egyes

kötés energiája minimális. Mondhatjuk, hogy a kötések között nincs versengés, mindegyik ugyanúgy orientálja a spineket. Az ilyen tulajdonságú kölcsönhatás nem csak ferromágneses lehet. Például, egyszerű köbös rácsokon a $J_{xy} < 0$ választás (antiferromágneses potenciál) szintén versengésmentes: a két antiferromágneses alapállapot kötésenként minimalizálja az energiát. Ha azonban rögzítjük a kötések abszolút értékét, $|J_{xy}| = \tilde{J}_{xy}$, és tekintjük azt a kölcsönhatás-családot, amelyet az előjelek különféle választásával generálhatunk, akkor könnyen beláthatjuk, hogy a fenti tulajdonsággal a modelleknek csak egy töredéke bír. Ha $\text{sgn } J_{xy} = \tau_x \tau_y$, ahol $\tau_x = \pm 1$, akkor $H(\tau) = - \sum \tilde{J}_{xy}$; a kölcsönhatás versengésmentes, τ és $-\tau$ alapállapotok. Az előjelek bármely más választása esetén az alapállapot konfigurációk nem minimalizálják az összes kötés energiáját; bizonyos kötések „nem elégülnek ki”, „frusztráltak” lesznek. A v dimenziós köbös rács egy N pontú kockáját tekintve, a frusztrációmentes kölcsönhatások száma 2^N , szemben $2^{vN} - 2^N$ számú olyannal, amely kielégítetlen kötést tartalmaz minden spinkonfigurációban.

Az érdeklődés a frusztrált kölcsönhatások iránt a spinűvegek elméletének fejlődésével párhuzamosan alakult ki. A spinűvegek különleges mágneses viselkedésű anyagok, amelyek mind kísérleti, mind elméleti szempontból nehéz feladat elé állították a fizikusokat. A klasszikus spinűveg nemesfémek híg mágneses ötvöze [3a]. A két legtöbbet vizsgált anyag a CuMn és az AuFe rendszer, tipikusan néhány százalékos mágneses atom koncentrációval. A kísérletekben sok olyan adat halmozódott fel, amelyeket nehezen lehet egy elmélet kereteibe foglalni. A mágneses szuszceptibilitás magas hőmérsékleten a Curie—Weiss törvényt követi (Owen és tsai, 1956).

$$\chi = C/(T - \Theta),$$

ahol a Curie-hőmérséklet nagyjából arányos a mágneses komponens koncentrációjával és nagyságrendje CuMn -re 5 K/at %. Ha a rendszert a vélt Curie-hőmérséklet környezetére lehűtik, egy, a Θ -nál nagyobb hőmérsékleten a szuszceptibilitás csökkeni kezd, mintha a rendszer antiferromágnesessé válna. Antiferromágneses rendeződés neutrondiffrakcióval nem mutatható ki (Arrott, 1965), viszont az AuFe -ban végzett Mössbauer mérésben (Violet és Borg, 1966) egy viszonylag kis, 10 K-es hőmérséklet-intervallumban kifejlődik a felhasadt Mössbauer-vonal hatos struktúrája. Ez arra utal, hogy alacsony hőmérsékleten éles átmenettel lokális mágneses tér jelenik meg, amely a Mössbauer-mérés időskáláján (10^{-7} s) stabil. Jóldefiniált átmeneti hőmérsékletet lehetett lokalizálni a váltóáramú mágneses szuszceptibilitás hőmérséklet függvényében jelentkező csúcsával (Cannella, Mydosh, 1972). A csúcs létezését úgy értelmezték, mint újabb érvet az antiferromágneses rendeződés mellett, de utóbb kiderült, hogy nem-egyensúlyi jelenségről van szó (például Nagato és tsai, 1979). A statikus szuszceptibilitásnak ugyanis alacsony hőmérsékleten van egy reverzibilis és egy irreverzibilis ága. Az utóbbit úgy lehet megkapni, hogy a mintát természetesen lehűtik, majd bekapcsolt kis (néhány oersteds) állandó mágneses tér mellett melegítve mérik a mágnesességet. Ez a hőmérséklettel növekszik egy maximumig, amit az átalakulási hőmérsékleten vesz fel. Innen a mintát változatlan mágneses

térben visszahűtve, a mágnesezettség egy platón marad, és ugyanez a plató mérhető ki, ha a mintát a mérőtérben hűtik le vagy a tér jelenlétében ismételten felmelegítik. A plató reprezentálja tehát a reverzibilis statikus szuszceptibilitást, míg a váltóáramú szuszceptibilitás csúcsa azért alakul ki, mert alacsony hőmérsékleten a mágneses momentumok nehezen követik a váltakozó mágneses teret. A mért relaxációs idők az órák nagyságrendjébe esnek. Ez arra látszik utalni, hogy a tér nagy, nem egyetlen atomhoz tartozó momentumokat forgat. Fontos kísérleti információ még, hogy a fahőben nincs szingularitás, mindössze egy széles maximum.

Mint azt a kísérleteknek a hetvenes évek második felében indult újabb szakasza igazolta [3b, c, d, e], a spinüveg-jelenség igen kiterjedt, és bár elképzelhető, hogy a spinüveg képződésének más-más az oka egy nemesfém alapú híg mágneses ötvözetben (Au (5% Fe)), egy amorf szigetelőben ($Al_2Mn_3Si_3O_{12}$) vagy a lapcentrált köbös rácsú szigetelő $Eu_{0.5}Sr_{0.5}S$ -ban, van közös rendezőelv is. Az esetek többségében kimutatható vagy feltételezhető a frusztráció, a kölcsönhatások versengése.

A spinüvegek elmélete 1975-ben vett új lendületet *Edwards* és *Anderson* fontos cikke nyomán, amelyben a szerzők a spinüvegek matematikai leírására szabályos rácscon elhelyezkedő és véletlenszerűen kiválasztott, de rögzített kötésekben át kölcsönható spinek rendszerét javasolták. Az egyik első próbálkozás *Mattis*é [2], aki a kötések előjelét a $\text{sgn } J_{xy} = \tau_x \tau_y$ alakba vette fel és az τ_x -eket tekintette független változóként. Bár mágneses tér jelenlétében a *Mattis*-spinüveg nemtriviális tulajdonságú, fizikai szempontból nem kielégítő modell. Egyrészt, ugyanaz a szabadenergiaja (nulla külső térben), mint a ferromágneses modellnek, és így ez utóbbiával azonos a fahő-singularitás is, szemben a spinüvegekben tapasztalt széles fahő-maximummal. Másrészt, a kötések nulla hőmérsékleten vannak „termikus” egyensúlyban a spinekkel (a kötések és spinek megválasztásával minimalizálható a szabadenergia = energia nulla hőmérsékleten), szemben a fizikailag reális pozitív és a modellekben elfogadható végtelen hőmérséklettel [7]. A korábbi diszkusszió során láttuk, hogy azokban a kölcsönhatásokban, amelyekre a *Mattis* modell kiterjed, nincs frusztráció. Hogy kudarcot vall, annak oka éppen ez lehet. Az átlagtér-elmélet [4] már magába építi a versengést. Feltehetően ettől válik igen bonyolulttá, de ez magyarázza azt is, hogy ma már eléggé adekvát képet ad a spinüvegekről.

Az érdeklődő olvasó bőségesen talál kísérleti és elméleti szemszöveget összefoglalókat a spinüvegekről [5]. Mi a továbbiakban a frusztrációra fordítjuk figyelmünket.

A frusztráció ma már önálló kutatási terület, és ebben nagy szerepe van annak a törekvésnek, hogy a spinüvegek leírásában túl lehessen lépni az átlagtér-elméleten. Figyelembe véve ez utóbbi bonyolultságát, a frusztráció elmélete szükségképpen erősen matematizált. Ezt a jegyet a disszertáció is magán viseli. Bár az elmélet korántsem könyvelhet el olyan látványos sikereket, mint az átlagtér-közelítés (például nincs kimutatva a spinüveg-átmenet létezése), az eredmények bőségesek és érdekesek. Ezeket a II. fejezetben foglalom össze. Saját munkáimat két fejezetbe (III. és IV.) csoportosítva mutatom be. A könnyebb áttekinthetőség kedvéért ezek elején ismertetek néhány, a frusztrációhoz közvetlenül nem kötődő, de a fejezet anyagával rokon irodalmi eredményt. A harmadik fejezet témája a Peierls érvelés általánosítása frusztráció esetére, hét publikáció (négy független munka) összefoglalásaként. A negyedik fejezet a szabadenergia és a korrelációk analitikus tulajdonságait vizsgálja, négy publikáció alapján [6]. A hivatkozásokat fejezetenként gyűjtöttem össze. A disszertáció egy összefoglalással zárul.

II. VERSENGŐ KÖLCSÖNHATÁSÚ RENDSZEREK, FRUSZTRÁCIÓ

Aforisztikus fogalmazásban a frusztráció: versengés győztes nélkül. Frusztrációról tehát akkor beszélünk, ha a versengő kölcsönhatások között egyensúly van. Ennek egyik legszembeötlőbb tünete a zérusponthi entrópia: az alapállapotok számának megsokszorozódása. Ez a szám frusztráció esetén meghaladja azt, amit a szimmetria alapján várnánk. Például egy páros pontszámú halmazokon át kölcsönható ferromágneses Ising modellben, eltekintve az esetleges translációs szimmetriától, a Hamilton-függvény

$$H = - \sum_b J_b \prod_{x \in b} s(x) \quad (\text{II.1})$$

egyetlen szimmetria-transzformációja a globális előjelcsere, $s \rightarrow -s$. (Itt b páros pontszámú halmaz és $J_b \geq 0$.) Periodikus vagy szabad peremfeltétel esetén H -nak két alapállapota van, $s \equiv +1$ és $s \equiv -1$, amelyeket szimmetria-transzformáció köt össze. Ugyanez a helyzet minden frusztrálatlan (II.1) típusú Hamilton-függvénnyel. Ezzel szemben, ha a V térfogatbeli kötések között frusztráció van, akkor V -ben periodikus szabad vagy peremfeltétel esetén is több alapállapot van, mint ahány elemű a szimmetriacsoport. Kissé másképp fogalmazva: ha a V térfogatban frusztráció van, akkor V -ben tetszőleges peremfeltétel esetén egynél több alapállapot van. Ez ekvivalens azzal, hogy a teljes rácson vannak olyan alapállapotok, amelyekből lokális transzformációval újabb alapállapotok kaphatók. (Az ilyen alapállapotokat nem-izoláltak nevezzük.)

A versengés és a frusztráció egy másik jele, hogy bizonyos kötések menti korrelációk a hőmérséklet függvényében előjelet váltanak. Például, (II.1)-ben legyen $J_b \neq 0$. Akkor [7]

$$\langle \prod_{x \in b} s(x) \rangle \rightarrow \tanh \beta J_b \quad (\text{II.2})$$

ha $\beta \rightarrow 0$, azaz magas hőmérsékleten minden kötés „kielégül”,

$$\langle J_b \prod_{x \in b} s(x) \rangle > 0. \quad (\text{II.3})$$

Ha nincs versengés, (II.3) igaz marad minden hőmérsékletre, és nulla hőmérsékleten a tiszta fázisokban

$$\langle \prod_{x \in b} s(x) \rangle_{T=0} = \text{sgn } J_b. \quad (\text{II.4})$$

Ha versengés van, de frusztráció nincs, akkor a „győztes” kötésekre igaz (II.4), a „vesztesekre” pedig

$$\langle \prod_{x \in b} s(x) \rangle_{T=0} = -\text{sgn } J_b. \quad (\text{II.5})$$

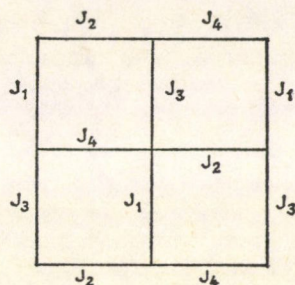
A frusztrációt az jellemzi, hogy vannak olyan spinszorzatok, amelyek várható értéke nem nő 1 abszolút értékűre, ha a hőmérséklet nullához tart. Ilyen korrelációt találhatunk a kötések mentén,

$$|\langle \prod_{x \in b} s(x) \rangle_{T=0}| < 1 \quad (\text{II.6})$$

és egyéb pont-halmazokon is (lásd a IV. fejezet 4. pontját). Ugyanakkor azt is látjuk, hogy a versengés és a frusztráció szembeállítás (II.5) és (II.6) alapján kissé mester-

kélt, hiszen alacsony, de pozitív hőmérsékleten nehéz a kettő között különbséget tenni.

A frusztrációs modellek első felismert példája volt az antiferromágneses pár-kölcsönhatású Ising modell a háromszögrácson. Ennek szabadenergiáját Wannier 1950-ben kiszámolta [1] Onsager módszerével, megállapította, hogy pozitív hőmérsékleten a szabadenergia analitikus és a rendszernek zérus ponti entrópiája van. A négyzet rácson az antiferromágneses modell nem frusztrált, de az úgynevezett „általános négyzet rácson-model”, amelynek szabadenergiáját négy első-szomszéd kölcsönhatás, J_1, J_2, J_3, J_4 függvényében Utiyama [2] megkapta,

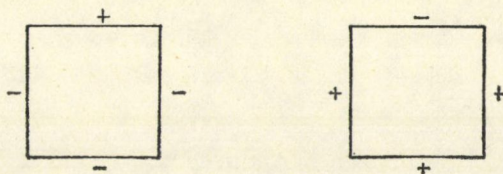


speciális esetként ($J_1 = J_2 = J_3 = -J_4$) tartalmazza a négyzet rácson „teljesen frusztrált” modelljét. A háromszögrácson-antiferromágnes kapcsán megfogalmazható egy általános elv, mely szerint olyan rácson, amelyek nem bonthatók fel két ekvivalens alrácsra úgy, hogy az egyik alrács pontjainak minden első szomszédja a másik alrácsra legyen, az antiferromágneses modellek különlegesen viselkednek. Ez a kijelentés vonatkozik minden szoros pakolású rácson, így a lapcentrált köbös rácson is [61]. Az lcc-rácson Ising antiferromágnesről mind a mai napig kevés biztos tudomásunk van; Monte Carlo számítások [3] alátámasztják azt a sejtést, hogy a hőmérséklet függvényében elsőrendű fázisátmenet megy végbe.

A frusztráció mint önmagában érdekes statisztikus fizikai probléma iránt az érdeklődés a hetvenes évek második felében nőtt meg, amikor ebben ismerték fel a spinűveg képződésének feltételét. Villain [4] volt az első, aki módszeresen vizsgált frusztrációs modelleket, mégpedig első-szomszéd kölcsönhatású Ising, XY és Heisenberg modelleket,

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \tilde{s}(i) \cdot \tilde{s}(j),$$

amelyekben $|J_{ij}| = J$, és a kötések minden „elemi poligonjában” páratlan a negatív J_{ij} -k száma. Ezzel az „odd rule”-al úgynevezett „odd” vagy teljesen frusztrált modelleket definiált: a kötések minden elemi ciklusában frusztráció van. Például, ha egy négy kötésből álló ciklusban egy vagy három negatív kötés van,



akkor a csúcsokhoz tartozó négy spin tetszőleges konfigurációjában egy vagy három kötés kielégíthetetlen.

A frusztráció a kötések valamiféle rendezetlenségét jelenti. Ennek a rendezetlenségnek a leírására kézenfekvően kínálkoztak elektrodinamikai analógiák, a lokális invariancia elve [5, 6]. Tekintsük a (II.1) Hamilton-függvényt. Ha az

$$s(x) \rightarrow -s(x)$$

cserével egyidejűleg végrehajtjuk a

$$J_b \rightarrow -J_b$$

cserét mindazon $J_b \neq 0$ -kra, melyekre $x \in b$, akkor H nem változik. Általában, tetszőleges $\tau = \{\tau(x)\}$ Ising-spinkonfigurációval definiálható egy transzformáció, melyet szimultán hajtunk végre a spineken és a kötéseken,

$$\begin{aligned} s &\rightarrow \tau s = \{\tau(x)s(x)\} \\ J &\rightarrow \tau J = \left\{ \left(\prod_{x \in b} \tau(x) \right) J_b \right\} \end{aligned} \quad (\text{II.7})$$

és amelyre nézve a Hamilton-függvény invariáns. Ezek a transzformációk egy gauge csoportot generálnak. Ha két kölcsönhatás, J és J' , csak egy (II. 7) transzformációban különbözik, akkor a hozzájuk tartozó állapotösszeg ugyanaz. Valóban, legyen $J' = \tau J$, akkor

$$Z(\tau J) = \sum_s e^{-\beta H(\tau J, s)} = \sum_s e^{-\beta H(J, \tau s)} = \sum_s e^{-\beta H(J, s)} = Z(J).$$

Itt felhasználtuk, hogy $\tau^2 = 1$. Ezért a Mattis-spinüvegben (lásd a Bevezetőt) előforduló minden kölcsönhatás,

$$J = \{J_{xy} = \tau(x)\tau(y)\}$$

gauge-ekvivalens a ferromágnesessé, a kötések rendezetlensége nem lényeges. A frusztráció lényeges rendezetlenség, amely gauge-transzformációval nem tüntethető el. Valóban, ha a kötések valamilyen $c = \{\langle i_1 i_2 \rangle, \langle i_2 i_3 \rangle, \dots, \langle i_{n-1} i_n \rangle, \langle i_n i_1 \rangle\}$ ciklusában frusztráció van, akkor a negatív kötések száma páratlan,

$$\prod_c J_{ij} < 0, \quad (\text{II.8})$$

és ez a szorzat invariáns a (II.7) transzformációkra nézve. Ha $|J_{ij}| = J$ minden párra, akkor a szabadenergia csak a ciklikus kötésszorzatoktól függ, nem pedig az egyes kötésektől [7]. A frusztráció leírásához viszont nem szükséges minden ciklus mentén megadni $\prod_c J_{ij}$ előjelét, elég ezt megtenni az elemi ciklusokra, az úgynevezett plakettkekre. Úgyanis

$$\text{sgn} \prod_{\langle ij \rangle \in c} J_{ij} = \prod_{\substack{p \text{ a } c-n \\ \text{belül}}} \text{sgn} \prod_{\langle ij \rangle \in p} J_{ij} \equiv \prod_{\substack{p \text{ a } c-n \\ \text{belül}}} \varphi_p. \quad (\text{II.9})$$

A φ_p „plakettváltozó” értéke -1 , ha a plakett frusztrált („odd”, Villain terminológiája szerint). A modellt teljesen frusztráltnak nevezzük, ha minden plakettje frusztrált. A φ_p változók két dimenzióban függetlenek, azaz definiálható úgy egy kölcsönhatás, hogy először rögzítjük φ_p -t minden plakettre tetszés szerint, és ezzel összhangban

vesszük fel a kölcsönhatást meghatározó többi mennyiséget. Három és magasabb dimenzióban ez nem tehető meg: például egy kocka hat lapjához tartozó φ_p -k szorzata mindig +1 kell legyen, mert a kocka minden éle kétszer szerepel a szorzatban. Egyéb érdekes jelenségek is vannak: például, a jobban frusztrált modell nem feltétlenül kevésbé rendezett. Ez igaz abban az értelemben, hogy a zérusponti entrópia lehet kisebb, a párkorreláció pedig nagyobb abban a modellben, amely jobban frusztrált. Ez a helyzet a négyzet rácson a teljesen frusztrált [4] és a „sakktábla” modellel [8]. Az utóbbiban sakktábla-szerűen csak minden második négyzet frusztrált, a zérusponti entrópia viszont nagyobb, és a párkorrelációk nulla hőmérsékleten gyorsabban csengenek le, mint a teljesen frusztrált modellben [18, 20]. Másrészt, a fázisátmenetet mutató modelleket összehasonlítva, a kritikus hőmérséklet nem feltétlenül kisebb ott, ahol nagyobb a zérusponti entrópia. E kérdések szisztematikus vizsgálata két-dimenziós, periodikusan frusztrált Ising modellek esetében volt lehetséges [8–26], főként a szabadenergia és a párkorrelációk egzakt kiszámításával. Külön említésre méltó a Zittartz és társai által vizsgált model család [11–16, 20–24], az úgynevezett rétegesen frusztrált modellek, melyekben az első-szomszéd párkölcsönhatás vízszintes vagy diagonális eltolásra nézve invariáns, egyébként pedig tetszőleges periódussal változhat. Általános következtetés, hogy a frusztráció meggátolhatja a fázisátmenetet; ha van átmenet, akkor a szabadenergia szingularitása logaritmikus [11–13], mint a ferromágneses modellben. Amikor nincs fázisátmenet pozitív hőmérsékleten, akkor nulla hőmérsékleten a párkorrelációk általában az

$$\langle s(x)s(y) \rangle \sim |x-y|^{-1/2} \quad (\text{II.10})$$

aszimptotika szerint csengenek le [18–20, 23, 24, 27]. E disszertáció szerzője publikálta először (lásd az I. pont 6b hivatkozásait), hogy a lecsengés bizonyos modellekben exponenciális is lehet, például a Kagomé rácson definiált antiferromágneses vagy teljesen frusztrált modellben. Utóbb ilyen „szuperfrusztrált” modellnek bizonyult a sakktábla-modell [20] és a méhsejtrács teljesen frusztrált modellje [23] is.

Magasabb dimenzióban további érdekes jelenségek léphetnek föl. Ilyen a már említett elsőrendű fázisátmenet az lck-rács Ising antiferromágnesben [3], amely a Monte-Carlo számítások szerint mágneses tér jelenlétében is fennmarad [28]. Wegner a rács-gauge-elméletet megalapozó cikkében [29] konstruál olyan három dimenziós versengő kölcsönhatású modellt, amelyben a szabadenergia szinguláris valamilyen pozitív hőmérsékleten, de ezalatt a hőmérséklet alatt nincs hosszútávú rend. Az ANNNI modellekben [30–35], amelyek általános esetben nem frusztráltak, csak versengők, a fázisátmenetek kaszkádja első-szomszéd ferromágneses és másod-szomszéd antiferromágneses kölcsönhatás rivalizálásából következik. Négy dimenzió fölött általános jelenség, hogy a teljesen frusztrált modellek „túlfrusztráltak” abban az értelemben, hogy az alapállapotban a plakettek véges hányadában egynél több kielégítetlen kötés van. Ez összefügg azzal, hogy a frusztrált plakettek előfordulása geometria kényszernek van alávetve, és következményeként megnő az alapállapot energiája: a nem-frusztrált rendszerekben szokásos

$$E_0 \sim -z$$

reláció helyett

$$E_0 \sim -\sqrt{z}, \quad (\text{II.11})$$

a fajlagos alapállapot energiája a z koordinációs szám négyzetgyökével lesz arányos.

A szokásos spinüveg-modellekben a kötéseket véletlenszerűen, egymástól függetlenül, egyforma eloszlás szerint választják ki. Ha az eloszlás megenged pozitív és negatív kötéseket is, akkor a kölcsönhatás tipikus megvalósulásaiiban frusztráció van. Tekintsünk például négyzet-plaketteket, és legyen $J_{ij} < 0$ x valószínűséggel. Akkor a (II.9) egyenlőséggel definiált plakettváltozóra fennáll, hogy

$$\phi_p = -1, \quad c = 4[x(1-x)^3 + x^3(1-x)] \quad (\text{II.12})$$

valószínűséggel, azaz c koncentrációban fordulnak elő a frusztrált plakettek. Azt várjuk, hogy x kis értékeire a modell lényegében ferromágneses, azaz ferromágneses típusú fázisátmenet történik benne. Ez Ising modellekre Peierls-érveléssel igazolható is [36–37], az x_0 fázishatár (x azon értéke, amelyre a ferromágnesség eltűnik) azonban csak pontatlanul adható meg, és nem ismerünk egzakt kijelentést arra nézve, hogy $x > x_0$ esetén a rendszernek milyen az alacsony-hőmérsékleti tulajdonsága. Általánosan elfogadott, hogy Ising modellekben négy dimenzió alatt pozitív hőmérsékleten nincs spinüveg-fázis. A modellek alapállapota messze nem triviális, sok munka foglalkozik vele [6, 38–43]. Az érdekes kérdések itt az alapállapot energiája, entrópia a negatív kötések koncentrációjának függvényében, a fázishatár vagy fázishatárok helye, az alapállapot konfigurációk geometriai jellemzése. Az utóbbival kapcsolatosan különösen érdekes munka *Barahona és társai* [39], akik a kétdimenziós Ising modellben nulla hőmérsékleten két fázishatárt találnak $x < 1/2$ -re: $x < 0.1$ -re az alapállapot tipikusan ferromágneses, benne a szabadon átfordítható spinnek szigeteket alkotnak. $x > 0.15$ -re a szabad spinnek perkolálnak, egy paramágneses fázis létezik. A közbenső tartományban, $0.1 < x < 0.15$ esetén a szabad spinnek véges szigetekbe szorúlnak, a ferromágneses tartományt pedig doménfalak feldarabolják. A szerzők ezt a fázist „random antiphase”-nek nevezik. Ennek a létezése nem általánosan elfogadott, *Morgenstern és társai* [43] szerint a ferromágnesség $x \approx 0.12$ -nél tűnik el, és átadja a helyét egy nem-merev fázisnak, amelyben a korrelációk hatványfüggvény szerint csengenek le. Abban egyetértés van, hogy $x = 0.15$ fölött nincs spinüveg-fázis pozitív hőmérsékleten.

Az eddigiek Ising modellekre vonatkoztak. A frusztráció hasonló jelenségekre vezet a $q \geq 3$ állapotú antiferromágneses Potts modellekben [44–46]. Elképzelhető [44], hogy kellően magas dimenzióban különleges alacsony-hőmérsékleti fázis létezik, algebrai lecsengésű korrelációkkal.

A frusztráció érdekes következményekkel jár magasabb spin-dimenziójú rendszerekben is. Az elmélet itt kevésbé kidolgozott. Az XY modellben [4, 47–50] a frusztráció már az alapállapotba „félörvény” hibákat kényszerít bele. Eltekintve a folytonos szimmetriatranszformációtól (globális rotáció), az alapállapot félörvények két különböző értelemben („chiralitással”) fordulhatnak körbe. Kézenfekvőnek kínálkozik az analógia a ferromágneses XY modell alacsony-hőmérsékleti fázisának Kosterlitz–Thouless féle leírásával [51]. Két azonos chiralitású frusztrált plakett egy teljes örvényt alkot, amelynek a rendszer méretével logaritmikusan nő az energiája. Ezért a frusztrált plakettek alacsony hőmérsékleten ellentétes chiralitású párokat képeznek. Villain szerint a ferromágneses XY modellre felállított kép [51] lényegében érvényben marad a teljesen frusztrált XY modellre [47]: nincs mágneses rendeződés, de a mágneses szuszceptibilitás divergál valamilyen kritikus hőmérséklet alatt. Ezenkívül, a frusztrált plakettek chiralitásához rendelhető Ising típusú változó, $\tau = \pm 1$, antiferromágnesesen rendeződik. Ez a párkorrelációkban nem hagy nyo-

mot, de tükröződik a 4-spin korrelációkban [48]. Ha a frusztrált plaketteket véletlenszerűen választjuk ki x koncentrációban, akkor Villain szerint [48] $x < x_c \approx 0.58$ esetén megszűnik alacsony hőmérsékleten a chirális rendeződés. A rövidtávú chirális rend mindazonáltal fennmarad, a frusztrált plakettek antiferromágneses chirális rendű klasztereket alkotnak. Ezekben a rend lokálisan stabil; az XY spinűveg tehát egy olyan kétnívós rendszernek [52] tekinthető, amelyben a két energianívó frusztrált plakettek egy chirálisan rendezett klaszteréhez tartozik.

A frusztráció elméletét Heisenberg modellekben csak makroszkopikus szinten, tehát kontinuum-elmélet keretében tárgyalták [53, 54]. Míg Ising és XY modellek esetében a frusztrált plakettek topológiai hibát képeznek, addig a Heisenberg modellben ez nem áll fenn, és a chiralitás-változásnak megfelelő mikroszkopikus átmenetet nem ismerünk.

Frusztrált kölcsönhatású kvantum-spin-modellekre viszonylag kevés eredmény van. Legkiterjedtebben a háromszögrácson az antiferromágneses modellt vizsgálták $S=1/2$ esetén [55–60]: az izotróp [56–58] és az anizotróp [55] Heisenberg modellt, valamint az XY modellt Z -tengelyirányú külső térben [59, 60]. A következtetés minden esetben az, hogy a frusztráció érezteti a hatását. A frusztrált Ising modell alapállapotú degenerációja felhasad, de a kvantumrendszer nem degenerált alapállapotában a korrelációk kvalitatíve úgy viselkednek, mint a klasszikus rendszerben. Az XY modellben a renormálási csoport módszerével megmutatható [59], hogy a korrelációk hatványfüggvény szerint csengenek le, és a lecsengés gyorsul a növekvő frusztrációval.

III. PEIERLS-ÉRVELÉS ISING FRUSZTRÁCIÓS MODELLEKRE

A kérdés, amelyet ebben a fejezetben vizsgálunk, a következő:

Ha tekintünk egy frusztrált rendszert, akkor ezt mindig összehasonlítjuk egy frusztrálatlanl, például egy ferromágnesessé, amelyet úgy nyerünk, hogy a frusztrált rendszer minden jellemzőjét — a spin típusát (Ising, XY , Heisenberg stb.), a rácst, a kölcsönhatások jellegét — megőrizzük, pusztán a csatolási állandókat (kötéseket) az abszolút értékükkel helyettesítjük. Egy így kapott ferromágneses Ising rendszerben a korrelációk nagyobbak, mint a kiindulási rendszerekben, amelyekhez referenciaként szolgál (Griffiths [1]). Ezért a frusztrált rendszer rendeződési hőmérséklete alacsonyabb, mint a ferromágnesesé, ha rendeződés egyáltalán előfordul. A ferromágneses párkölcsönhatású Ising modellekben kettő és magasabb dimenzióban van fázisátmenet pozitív hőmérsékleten: a kritikus hőmérséklet alatt a globális spinátfordítási szimmetria sérül, rendezett tiszta fázisok jelennek meg. Mivel a frusztráció képes eltüntetni a fázisátmenetet, szeretnénk egy általános feltételt adni arra, hogy milyen mértéke egyeztethető még össze a rendeződéssel.

Rendeződés egzakt matematikai bizonyításához viszonylag kevés eszköz áll rendelkezésre. Ezek egyike a Peierls érvelés [2]. A gondolatmenet a statisztikus mechanika azon jól ismert elvén alapul, hogy egy rendszert egyensúly esetén a fázisában olyan eloszlás jellemez, amely minimalizálja a szabadenergiát. Az eljárás eszerint az, hogy feltételezünk egy rendezett fázist, elképzeljük azokat a gerjesztéseket, amelyek képesek letörni ezt a rendet és kiszámoljuk az ezen gerjesztésekkel járó szabadenergia-változást. Ha ez negatív, a feltételezett rend nem létezik; ha pozitív, akkor a rend

stabil. A válasz függhet a hőmérséklettől, mert mind az energia, mind az entrópia nő a gerjesztésekkel, a járulékok a szabadenergiában különböző előjelű, és a két tag aránya a hőmérséklettel változik.

Ez a program az Ising modellekben egzaktul véghezvihető, mert a gerjesztéseknek egyszerű geometriai jelentése van: egy tartományban megfordítjuk a spineket, és e tartomány határa egyértelműen jellemzi a gerjesztést.

Ha csak első szomszédok hatnak kölcsön, a gerjesztési energiát (ferromágneses modellben) megadja a határ hossza, és ugyanezzel becsülhető az adott határhosszúságú gerjesztések entrópiája. (Mindezt később szabatosan tárgyalni fogjuk.) Az érvelés kiterjeszthető olyan rácsmodellekre, amelyekben a spin véges sok értéket vehet föl és a kölcsönhatás véges hatósugarú, mert ebben az esetben az entrópia-bebecslés változatlan, csak a határ definícióját kell módosítani^[3]. A rendeződés az eredetitől nem különböző gondolatmenettel bizonyítható, ha a gerjesztések fajlagos (egységnyi határhosszra eső) energiája minden gerjesztésre meghalad egy pozitív konstans.

Közbevetőleg megjegyezzük, hogy az energia-entrópia-érv kiterjesztése folytonos spinekre már ferromágneses kölcsönhatás esetén is korlátozott. A probléma az, hogy a lehetséges gerjesztések nem jellemezhetők pusztán geometriailag, számuk már véges térfogatban is végtelen. Ennek ellenére, az érvelés keresztülvihető az anizotróp Heisenberg modellre,

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} [s_z(i)s_z(j) + \alpha(s_x(i)s_x(j) + s_y(i)s_y(j))],$$

ha $J > 0$ és $|\alpha| < 1$ (Malyshev [4]). Az izotróp Heisenberg modellben ($\alpha = 1$) két dimenzióban nincs rendeződés [5], három dimenzióban van, de egész más technikával bizonyítható [6]: a Peierls érvelés végképp nem alkalmas folytonos szimmetria sérülésének igazolására.

Az Ising modellekre visszatérve azt mondhatjuk, hogy a Peierls-érvelés az eredeti gondolatmenet szerint elvégezhető, ha egy adott spint érintő E energiájú elemi gerjesztések (lásd később) $S(E)$ entrópiájára fennáll, hogy

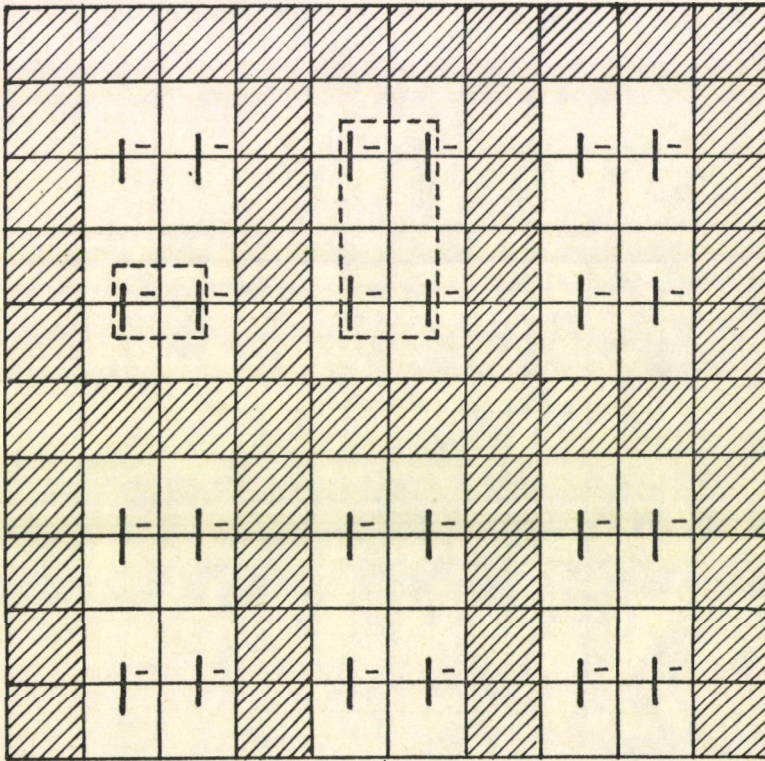
$$E/S(E) > c > 0$$

valamilyen E -től független c számmal. A frusztráció előidézheti, hogy a fenti arány E bizonyos értékeire nulla lesz, de ez még nem zárja ki a spontán szimmetria-sértést. Ebben a fejezetben ezt a kérdést vizsgáljuk a legegyszerűbb rendszerekben: az elsőszomszéd párkölcsönhatású Ising modellekben, ahol még azt is feltesszük, hogy a kölcsönhatások abszolút értéke rögzített, például egységnyi. Minden ilyen Hamilton-függvény invariáns a globális spinátfordításra, ez tehát az a szimmetria, amelynek sérülését be szeretnénk bizonyítani. $E/S(E)$ kétféleképpen lehet nulla. Az egyik lehetőség az, hogy léteznek olyan, véges tartományra kiterjedő „gerjesztések” (egy adott alapállapothoz viszonyítva), amelyek energiája nulla. A második fejezetben említettük, hogy ez a jelenség tipikus a frusztrációra. Ehhez kapcsolódik a fejezet első két tétele. A másik lehetőség az, hogy bizonyos véges E energiával végtelen sok elemi gerjesztés létezik, tehát $S(E)$ végtelen. A harmadik tételben egy ilyen példán bizonyítjuk a rendeződés felléptét. Mielőtt a tételeket szabatosan kimondanánk, talán nem fölösleges vázlatosan ismertetni őket, és például illusztrálni az állításukat.

Az 1. tétel vázlatosan

Nevezzük egy s^0 alapállapothoz viszonyított „elemi” gerjesztésnek azt, hogy a spineket egy összefüggő tartományon megfordítjuk. A gerjesztés határának e tartomány határát nevezzük. Megengedjük, hogy létezzenek elemi gerjesztések s^0 fölött nulla energiával, de feltesszük, hogy van olyan rácspont, amelyet tartalmazó elemi gerjesztések körében igaz, hogy bizonyos véges határhossz fölött e gerjesztések energiája nagyobb, mint a határhossz valamely pozitív számszorosa. Ilyen feltételek mellett bizonyítható, hogy valamely $T_0 > 0$ hőmérséklet alatt a Hamilton-függvény szimmetriája sérül.

A tétel vonatkozik nem-periodikus kölcsönhatásra is és tetszőleges, egynél nagyobb dimenzióra. Egy kétdimenziós példa a következő:



A rajzon bejelölt kötések negatívak, a többiek pozitívak. Az s^0 alapállapotban minden spin pozitív, ezért a negatív (és csak a negatív) kötések kielégítetlenek. Ezt jelöljük a kötések áthúzó szakasszal. A szaggatott vonallal határolt elemi gerjesztések nulla energiájúak. Az elemi gerjesztések energiáját úgy kell kiszámolni, hogy a határhossz feléből le kell vonni a határra eső áthúzott kötések számát. Látható, hogy

8-nál hosszabb határú elemi gerjesztésekre teljesül a feltétel; ha pedig a besatírozott tartomány határán levő spineket tekintjük, akkor az ezeket tartalmazó *minden* elemi gerjesztésre igaz a feltétel. Tetszőleges, a sráfozott tartomány határán levő x pontra bizonyítható, hogy

$$\langle s(x) \rangle \rightarrow s^0(x),$$

ha a hőmérséklet nullához tart. Az s^0 szerint teljesen rendeződő spinek tehát egy perkoláló hálózatot alkotnak. Felmerül a kérdés, hogy ez szükségszerű-e ahhoz, hogy spontán szimmetriasértés létrejöjjön. Erre ad egyfajta választ a következő két tétel.

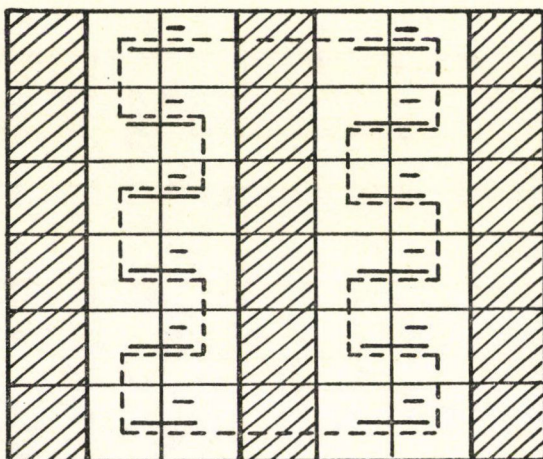
A 2. tétel vázlatosan

Két dimenzióban, az 1. tétel feltételei mellett a teljesen rendeződő spinek halmaza pozitív sűrűségű, és e halmaznak van végtelen összefüggő része.

A tétel értelmezésével kapcsolatosan további megjegyzések következnek a szabatos tárgyalás során.

A 3. tétel vázlatosan

Tekintsük az alábbi rajzon definiált modellt:



A jelölt kötések negatívak, a többi pozitív. A negatív kötések az $s^0 \equiv +1$ állapotban kielégítetlenek, ezt ábrázoljuk a kötés áthúzásával. Ebben a modellben van rendeződés alacsony hőmérsékleten: van olyan fázis, amelyben a besatírozott sávok határán levő spinek teljesen rendeződnek s^0 szerint, a sávok közti spinekre pedig $\langle s(x) \rangle > 0$ a kritikus hőmérséklet alatt.

Ez a modell *nem* elégíti ki az 1. tétel feltételeit, és arra példa, hogy $E/S(E) = 0$ úgy, hogy $S(E) = \infty$ (a szaggatott vonallal jelölt elemi gerjesztés és tetszőleges, függő-

leges irányban „elnyúltabb” gerjesztés ugyanolyan energiájú). A teljesen rendeződő spinek ugyan végtelen összefüggő halmazokban vannak, de ezek nem perkolálnak (csak egy irányban végtelenek).

A továbbiakban rátérünk a formális tárgyalásra.

0. Peierls érvelés Ising ferromágnesre^[2]

Azt szeretnénk kimutatni, hogy a

$$H(s) = -J \sum_{\langle xy \rangle} s(x)s(y) \quad (J > 0) \quad (\text{III.0.1})$$

ferromágneses Ising modellnek $v=2$ dimenzióban és kellően alacsony hőmérsékleten létezik egy pozitívan mágnesezett fázisa. A (III.0.1) formális (végtelen) összeggel definiált Hamilton függvényt írjuk fel az origó közepű V négyzetre pozitív peremfeltétel mellett:

$$H_V^+(s) = -J \sum_{\langle xy \rangle \cap V \neq \emptyset} s(x)s(y), \quad s(x) = +1 \text{ ha } x \notin V, \quad (\text{III.0.2})$$

ahol $\langle xy \rangle$ első szomszéd párt jelöl. Legyen

$$\mu_{\beta, V}^+(s) = (Z_{\beta, V}^+)^{-1} e^{-\beta H_V^+(s)} \quad (\text{III.0.3})$$

a (III.0.2)-nek megfelelő Gibbs valószínűségi sűrűség; $Z_{\beta, V}^+$ a H_V^+ -hez tartozó állapotösszeget jelöli. Ha R_V^+ azon s konfigurációk halmaza, melyekre $s(x) = +1$ ha $x \notin V$, akkor tetszőleges $A \subset R_V^+$ -ra

$$\mu_{\beta, V}^+(A) = \sum_{s \in A} \mu_{\beta, V}^+(s) \quad (\text{III.0.4})$$

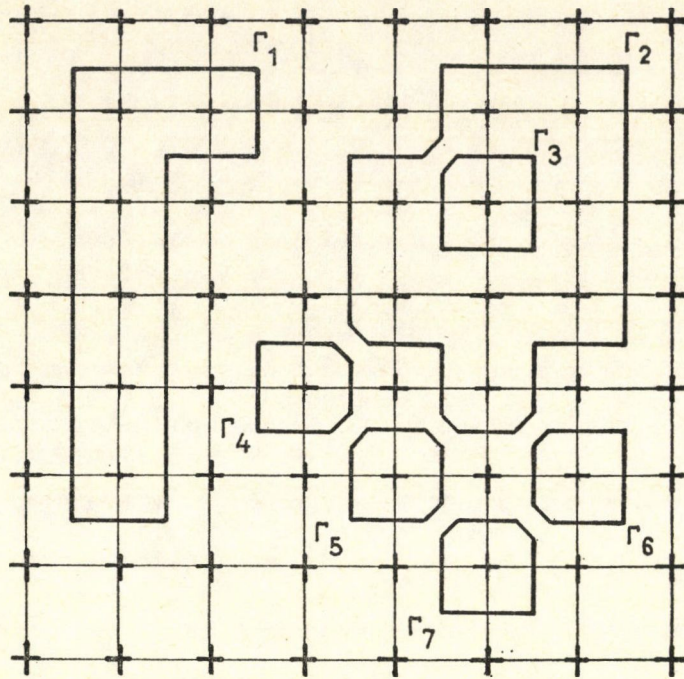
az A esemény valószínűsége. Az origóbeli spin, $s(o)$ várható értéke a végtelen rendszerben ($V \rightarrow \mathbb{Z}^2$) pozitív lesz, ha

$$\mu_{\beta, V}^+(s(o) = -1) \leq 1/2 - \varepsilon \quad (\text{III.0.5})$$

tetszőlegesen nagy V -re, valamilyen V -től független $\varepsilon > 0$ számra. Az $\{s(o) = -1\}$ esemény valószínűségét kell tehát megbecsülnünk. Ehhez bevezetjük a kontúr fogalmát. Tetszőleges $s \in R_V^+$ konfigurációban azon $x \in V$ pontokat, melyekben $s(x) = -1$, a duális rácson meghúzott zárt töröttvonallal határolhatjuk el azoktól, amelyekben $s(x) = +1$. A határvonal egy egyszerű (önmagát nem metsző) zárt darabját nevezük kontúrnak (lásd az ábrát). (A határ kontúrokra való felbontása nem egyértelmű, de bizonyos szabályok felállításával egyértelművé tehető.) Tetszőleges s konfiguráció, melyre $s(o) = -1$, egyértelműen jellemezhető a határával, azaz a kontúrok egy $\Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma_n$ halmazával; s -nek a ferromágneses konfigurációhoz viszonyított relatív energiája pedig

$$H_V^+(s) - H_V^+(+) = 2J \sum_{i=1}^n |\Gamma_i| \quad (\text{III.0.6})$$

ahol $|\Gamma_i|$ jelöli a Γ_i kontúr hosszát.



Nyilvánvalóan, ha $s(o) = -1$, akkor van egy Γ kontúr, amely az origót körülveszi. Jelölje A_Γ azt az eseményt, hogy a Γ kontúr benne van a konfiguráció határában. Legyen továbbá T_Γ a következő transzformáció:

$$(T_\Gamma s)(x) = -s(x), \quad \text{ha } x \text{ a } \Gamma\text{-n belül van} \quad (x \in \text{Int } \Gamma) \quad (\text{III.0.7})$$

$$= s(x), \quad \text{ha } x \notin \text{Int } \Gamma.$$

Könnyen belátható, hogy T_Γ kölcsönösen egyértelmű leképezés R_Γ^+ -on, és

$$\mu_{\beta, \nu}^+(A_\Gamma) = e^{-2\beta J|\Gamma|} \mu_{\beta, \nu}^+(T_\Gamma A_\Gamma). \quad (\text{III.0.8})$$

A fentieket felhasználva kapjuk az alábbi becslést:

$$\begin{aligned} \mu_{\beta, \nu}^+(s(0) = -1) &\leq \sum_{\Gamma: 0 \in \text{Int } \Gamma} \mu_{\beta, \nu}^+(A_\Gamma) \leq \sum_{\Gamma: 0 \in \text{Int } \Gamma} e^{-2\beta J|\Gamma|} = \sum_{l \geq 4} e^{-\beta J l} \sum_{\substack{\Gamma: |\Gamma| = l \\ 0 \in \text{Int } \Gamma}} 1 \\ &= \sum_{l \geq 4} e^{-2\beta J l} N_l. \end{aligned} \quad (\text{III.0.9})$$

Itt $2Jl$ az origót körülvevő l hosszú kontúrok energiája, $\ln N_l$ pedig az ilyen kontúrok entrópiája. Utóbbit még meg kell becsülnünk. Minden, az origót körülvevő l hosszúságú kontúr metszi az $x_2 = 0$ egyenest az $x_1 = 0$ és $x_1 = l/2$ abszcisszák között ($x = (x_1, x_2)$), és a kontúr mentén haladva, egy adott ponthoz eljutva, onnan legfőljebb három különböző irányban lehet továbbhaladni. Így

$$N_l \leq (l/2) \cdot 3^l. \quad (\text{III.0.10})$$

Ezt (III.9)-be beírva,

$$\mu_{\beta, V}^+(s(0) = -1) \cong \sum_{l \cong 4} (l/2) e^{-(2\beta J - \ln 3)l} \quad (\text{III.0.11})$$

Ha $T = 1/\beta < 2J/\ln 3$, akkor a jobb oldali sor konvergens és $T \rightarrow 0$ esetén tart 0-hoz. Ezért van olyan $\beta_0 < \infty$, hogy

$$\mu_{\beta_0, V}^+(s(0) = -1) \cong 1/2 - \varepsilon. \quad (\text{III.0.12})$$

Minthogy a (III.0.11) jobb oldalán álló összeg független V -től, ezért (III.0.12) tetszőleges V -re kielégíthető egy közös $\varepsilon > 0$ -val, és éppen ezt kellett bizonyítanunk.

1. Definíciók és jelölések; az eredmények ismertetése

A $v \cong 2$ dimenziós köbös rács, Z^v pontjait x, y, v, z stb. betűkkel jelöljük, $x = (x_1, x_2, \dots, x_v)$. x és y első szomszédok, ha $|x - y| = 1$. Az $\{x, y\}$ első szomszéd párt *élnék* nevezzük, jelölése $\langle xy \rangle$. Q a Z^v összes éleinek halmaza. Ha $V, W \subset Z^v$, akkor

$$\langle V, W \rangle = \{\langle xy \rangle \in Q : x \in V, y \in W\}.$$

$d(V, W)$ a V és $W \subset Z^v$ halmazok távolsága,

$$d(V, W) = \min_{\substack{x \in V \\ y \in W}} |x - y|.$$

Néha használni fogjuk az

$$\|x\| = \sum_{i=1}^v |x_i|$$

normát is. V és W p -összefüggőek, ha $d(V, W) \leq p$; V és W összefüggőek, ha 1-összefüggőek. A V halmaz p -összefüggő, ha V_1 és V_2 p -összefüggő tetszőleges $V = V_1 \cup V_2$ felbontásban; V pedig összefüggő, ha 1-összefüggő. A V halmaz határa

$$\partial(V) = \langle V, Z^v - V \rangle \subset Q.$$

Tetszőleges $A \subset Q$ élhalmazra az A *belső tartománya* (amely lehet üres is)

$$\text{Int } A = \cup \{V \subset Z^v : V \text{ véges és } \partial(V) \subset A\}.$$

Tegyük fel, hogy az $x, y, z, v \in Z^v$ pontok négy élet képeznek: $\langle xy \rangle, \langle yz \rangle, \langle zv \rangle$ és $\langle vx \rangle$. Ezek halmaza egy *négyzet*,

$$\langle xyzv \rangle = \{\langle xy \rangle, \langle yz \rangle, \langle zv \rangle, \langle vx \rangle\}.$$

(Más néven, $\langle xyzv \rangle$ egy „plakett”. Az eredmények más típusú rácsokra való kiterjesztésekor a négyzetet a megfelelő plakettel kell helyettesíteni.) Jelölje F a Z^v -beli összes négyzet halmazát. Legyen $A \subset Q$ tetszőleges élhalmaz, az A halmaz *végződése*

$$\varphi(A) = \{\sigma \in F : |\sigma \cap A| = 1 \text{ vagy } 3\}.$$

A és $B \subset Q$ összefüggő élhalmazok, ha van olyan $\sigma \in F$ négyzet, mellyel A -nak is, B -nek is van közös éle. Valamely $A \subset Q$ összefüggő, ha A_1 és A_2 összefüggőek tet-

szöveges $A = A_1 \cup A_2$ felbontásban. Legyen Q_0 a végződésmentes élhalmazok halmaza:

$$Q_0 = \{A \subset Q: \varphi(A) = \emptyset\}.$$

Q_0 egy elemét *kontúrnak* nevezzük, ha valódi része nem lehet végződésmentes. A kontúrok jelölésére a Γ betűt fogjuk használni. Γ összefüggő, és $|\Gamma \cap \sigma| = 0$ vagy 2 bármely σ négyzetre. (Itt és a továbbiakban, ha γ valamilyen halmaz, akkor $|\gamma|$ a γ elemszámát jelöli.) Bármilyen $\partial \in Q_0$ felbontható (nem feltétlenül egyértelműen) kontúrok diszjunkt uniójára.

Az eddigi definíciókhoz hadd tegyünk néhány magyarázó megjegyzést. Az $\langle xy \rangle$ él szemléltethető a duális rácsnak azon $v-1$ dimenziós „négyzetével”, amely az $\langle xy \rangle$ élre merőleges (két dimenzióban ez egy egységnyi hosszúságú szakasz). Egy élhalmaz, például egy $V \subset Z^v$ határa, tehát szemléltethető a duális rács egy $v-1$ dimenziós alakzatával (két dimenzióban egy töröttvonalal). Egy $\langle xyzv \rangle$ négyzet szemléltethető a duális rács rá merőleges $v-2$ dimenziós elemi alakzatával (két dimenzióban a négyzet középpontja). Ha az A élhalmaznak megfelelő duális rácsbeli $v-1$ dimenziós felületből elhagyjuk az egyszerű zárt felületeket, akkor a maradék éppen abban a $v-2$ dimenziós alakzatban végződik, amelyet az A végződéséhez rendeltünk. Az élhalmazok összefüggőségére adott definíció a duális rácsbeli alakzat természetes összefüggőségével esik egybe. Így a kontúroknak épp olyan geometriai alakzatok felelnek meg, mint amilyeneket kontúrnak definiáltunk a III.0. pontban. Egy $V \subset Z^v$ határa mindig végződésmentes: $\partial(V) \in Q_0$. $\partial(V)$ felbontható úgy kontúrookra, $\partial(V) = \Gamma_1 \cup \dots \cup \Gamma_n$, $\Gamma_i \cap \Gamma_j = \emptyset$, hogy ezek a V maximális összefüggő részeit vegyék körül. Tehát $V = \bigcup \text{Int } \Gamma_i$, ahol $\text{Int } \Gamma_i$ összefüggő, és $\text{Int } \Gamma_i$ és $\text{Int } \Gamma_j$ ($i \neq j$) nem összefüggők (de lehetnek $\sqrt{2}$ -összefüggők: ha két kontúr összefüggő, akkor a belső tartományaik $\sqrt{2}$ összefüggők).

A véges $V \subset Z^v$ térfogathoz definiált Hamilton függvény, miként (III.0.2)-ben,

$$H_V(s) = - \sum_{\langle xy \rangle \in \langle V, Z^v \rangle} J_{xy} s(x) s(y), \quad (\text{III.1.1})$$

ahol $|J_{xy}| = 1$. A végtelen rács spinkonfigurációinak halmaza $R = \{-1, 1\}^{Z^v}$. Ha $s^0 \in R$, akkor legyen

$$R(V, s^0) = \{s \in R: s = s^0 \text{ a } (Z^v - V) - n\}.$$

Egy $s^0 \in R$ konfiguráció *alapállapot* V -ben, ha

$$H_V(s^0) \equiv H_V(s)$$

minden $s \in R(V, s^0)$ -ra. Az s^0 konfiguráció *alapállapot*, ha alapállapot minden véges $V \subset Z^v$ tartományhoz.

Az s konfiguráció *határa*

$$\Omega(s) = \{\langle xy \rangle \in Q: J_{xy} s(x) s(y) = -1\}.$$

Valamely $\Omega \subset Q$ *határ*, ha van olyan $s \in R$, melynek határa. Egy konfiguráció határa függ mind a konfigurációtól, mind a kölcsönhatástól. A határ végződése azonban csak a kölcsönhatástól függ: $\langle xyzv \rangle \in \varphi(\Omega(s))$ akkor és csak akkor, ha

$$(J_{xy} s(x) s(y)) (J_{yz} s(y) s(z)) (J_{zv} s(z) s(v)) (J_{vx} s(v) s(x)) = J_{xy} J_{yz} J_{zv} J_{vx} = -1$$

Írható tehát $\varphi(\Omega(s)) = \varphi^J$. Tekintsük Q hatványhalmazát: $[Q]$ az összes élhalmazok halmaza. $\varphi \in F$ -re jelölje $Q_\varphi \subset [Q]$ azokat az élhalmazokat, amelyek φ -ben végződnek. Ha $\varphi = \varphi^J$ valamilyen J kölcsönhatásra, akkor Q_φ éppen a konfigurációk lehetséges határait tartalmazza, J kölcsönhatás esetén. A φ^J -beli négyzeteket frusztráltnak nevezzük. Eszerint Q_0 a határok halmaza ferromágneses potenciál esetén (vagy tetszőleges frusztráció-mentes kölcsönhatásnál). $[Q]$ kommutatív csoport a szimmetrikus differenciára nézve (az A és B halmazok szimmetrikus differenciája $A \circ B = (A \cup B) - (A \cap B)$). Q_0 egy alcsoport, és a $[Q]/Q_0$ faktorcsoporthoz tartozó $Q_{\varphi,J}$ osztályok. (Megjegyzendő, hogy két dimenzióban tetszőleges $\varphi \in F$ -hez $Q_\varphi = Q_{\varphi,J}$ valamely J -re, $v \geq 3$ esetén Q_φ lehet üres is, ha φ nem elégíti ki bizonyos geometriai feltételeket. Például három dimenzióban $Q_\varphi \neq \emptyset$ feltétele az, hogy φ -t a duális rácson egyszerű zárt töröttvonalak uniója reprezentálja. Megemlítjük továbbá, hogy $Q_{\varphi,J}$ valójában a kölcsönhatások egy egész osztályához — a J -vel gauge-ekvivalens kölcsönhatások osztálya — tartozik.) Eszerint, ha Q_φ nem üres, akkor

$$Q_\varphi = \{\Omega_0 \circ \partial : \partial \in Q_0\} \quad (\text{III.1.2})$$

ahol Ω_0 a Q_φ tetszőleges rögzített eleme.

Legyen $A, B \subset Q$, és A véges. Definíáljuk a

$$k(A|B) = |A - B| - |A \cap B| \quad (\text{III.1.3})$$

menyiséget. Ha $s \in R(V, s^0)$ és $\Omega(s^0) = \Omega_0$, akkor

$$H_V(s) - H_V(s^0) = 2k(\partial|\Omega_0), \quad (\text{III.1.4})$$

ahol ∂ -t az $\Omega(s) = \Omega_0 \circ \partial$ összefüggés definiálja (azaz $\partial = \Omega(s) \circ \Omega_0$). A továbbiakban Ω_0 mindig egy s^0 alapállapot határát jelöli, ∂ pedig Q_0 egy elemét. Eszerint

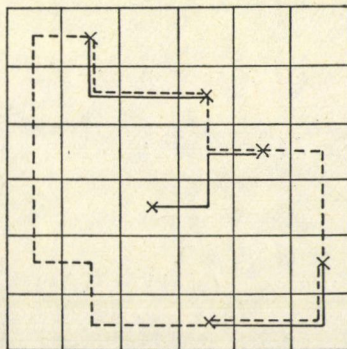
$$0 \leq k(\partial|\Omega_0) \leq |\partial|.$$

Ha $\partial = \bigcup \Gamma_i$ egy diszjunkt felbontás kontúrookra, akkor

$$k(\partial|\Omega_0) = \sum k(\Gamma_i|\Omega_0),$$

nem-negatív összeadandókkal.

A (III.1.2)—(III.1.4) egyenlőségeket illusztrálja az alábbi ábra.



A kihúzott vonal egy konfiguráció határa, Ω_0 . Keresztek jelölik azokat a négyzeteket, amelyekben a határ végződik. A szaggatott vonal $\partial \in Q_0$, a példában egyetlen kontúr. $\Omega_0 \circ \partial$ az $\Omega_0 \cup \partial$ azon része, amely csak egyszeresen — vagy szaggatott vagy teljes vonallal — van kihúzva. Figyeljük meg, hogy $\Omega_0 \circ \partial$ ugyanazokban a négyzetekben végződik, mint ∂_0 . $k(\partial|\Omega_0) = (\text{csak szaggatottan kihúzott szakaszok száma}) - (\text{duplán kihúzott szakaszok száma}) = 13 - 7 = 6$. Ω_0 egy alapállapot határa, mert benne a keresztek minimális összhosszúságú vonallal vannak összekötve.

Definíció

Adott egy s^0 alapállapot. Egy $x \in Z^v$ rácspont *Peierls pont*, ha létezik olyan $L, c > 0$, hogy

$$k(\Gamma|\Omega_0) \equiv c|\Gamma| \text{ ha } x \in \text{Int } \Gamma \text{ és } |\Gamma| \equiv L. \quad (\text{III.1.5})$$

Az s^0 alapállapotra teljesül a *Peierls feltétel*, ha (III.1.5) igaz valamilyen x pontra.

$P_{L,c}(s^0)$ -al jelöljük azon Peierls pontok halmazát, melyekre (III.1.5) teljesül. Továbbá,

$$P_L(s^0) = \bigcup_{c>0} P_{L,c}(s^0); \quad P(s^0) = \bigcup_{L \equiv 2v} P_L(s^0).$$

Mivel nincs kontúr $|\Gamma| < 2v$ -re, azért $P(s^0)$ az összes Peierls pontok halmaza. Legyen

$$L(x) = \min_{x \in P_L(s^0)} L. \quad (\text{III.1.6})$$

Nyilvánvaló, hogy ha $L(x) > 2v$, akkor van olyan Γ kontúr, hogy $x \in \text{Int } \Gamma$ és $k(\Gamma|\Omega_0) = 0$. Γ egy *nulla energiájú kontúr* x körül.

Állítás

1. $P(s^0)$ vagy az üres halmaz vagy a teljes rács.
2. Ha $x \in P_{L,c}(s^0)$, és Γ olyan kontúr, hogy

$$|\Gamma| \equiv \max \left\{ L + 2v - 2, \frac{(1-c)(2v-2)}{c} \varrho(\Gamma, x) + 4v + \frac{2}{c} - 3 \right\},$$

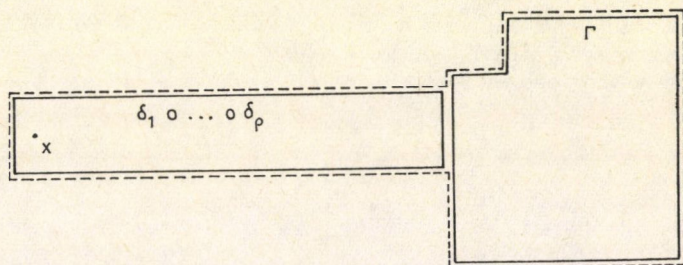
akkor $k(\Gamma|\Omega_0) > 0$. Itt

$$\varrho(\Gamma, x) = \min_{y \in \text{Int } \Gamma} \|y - x\|.$$

3. Ha $P(s^0)$ nem üres, akkor $L(x) \leq \text{const } \|x\|$.

Bizonyítás

Legyen $P(s^0)$ nem üres és $x \in P_{L,c}(s^0)$. Ha Γ olyan, hogy $x \in \text{Int } \Gamma$ és $|\Gamma| \equiv L$, akkor $k(\Gamma|\Omega_0) > c|\Gamma|$. Tegyük fel, hogy Γ nem fogja körül x -et. Ekkor $\varrho = \varrho(\Gamma, x) > 0$. Találhatók olyan $\delta_1, \dots, \delta_q$ kontúrok, hogy $|\delta_i| = 2v$ és $\Gamma' = \delta_1 \circ \dots \circ \delta_q \circ \Gamma$ már körbeveszi x -et.



Elemi becsléssel adódik, hogy

$$|\Gamma'| \cong |\Gamma| + 2(\varrho - 2)(v - 1).$$

Sokszor fogjuk használni a következő azonosságot:

$$\begin{aligned} k(\partial_1 \circ \partial_2 |\Omega|) &= k(\partial_1 |\Omega|) + k(\partial_2 |\Omega| \circ \partial_1) \\ &\cong k(\partial_1 |\Omega|) + |\partial_2|. \end{aligned} \quad (\text{III.1.7})$$

Ezt alkalmazva azt kapjuk, hogy

$$k(\Gamma' | \Omega_0) \cong k(\Gamma | \Omega_0) + 2\varrho(v - 1) + 2.$$

Fölidézve, hogy $k(\Gamma' | \Omega_0) \cong c|\Gamma'|$ ha $|\Gamma'| \cong L$, az előbbi egyenlőtlenségek azt adják, hogy

$$k(\Gamma | \Omega_0) \cong \varepsilon |\Gamma|,$$

feltéve, hogy

$$|\Gamma| \cong \max \left\{ L - 2(\varrho - 2)(v - 1), \quad 2 \frac{\varrho(v - 1) + 1 - c(\varrho - 2)(v - 1)}{c - \varepsilon} \right\}.$$

Ebből azonnal következik mindhárom állítás.

1. Tétel

Tegyük fel, hogy az s^0 alapállapotra teljesül a Peierls feltétel. Akkor van olyan $\beta_0 < \infty$, hogy $\beta > \beta_0$ -ra legalább két egyensúlyi állapot létezik.

Ha van olyan x pont, melyre $L(x) = 2v$, akkor van olyan $c \leq 1$ szám is, melyre $k(\Gamma | \Omega_0) \cong c|\Gamma|$ teljesül minden x -et körülvevő kontúrra. Ekkor az eredeti Peierls érvelés, ahogy III.0.-ban ismertettük, megismételhető, pusztán az origót x -szel, a pozitív peremfeltételt s^0 -lal kell helyettesíteni. Az 1. Tétel által leírt legérdekesebb esetben $P(s^0) = Z^v$ de $P_{2v}(s^0) = \emptyset$, azaz minden pont körül van 0 energiájú kontúr. A 2. Tétel azt állítja, hogy két dimenzióban ennek az ellenkezője tipikus: ha a Peierls feltétel teljesül, akkor a 0 energiájú kontúrok izoláltan, szigetekben helyezkednek el

2. Tétel

Legyen $v = 2$. Tegyük fel:

1. Az s^0 alapállapot kielégíti a Peierls feltételt.
2. Létezik egy $\vartheta > 0$ és egy végtelen trajektória

$$X = \{x_0 = 0, x_1, x_2, \dots : |x_i - x_{i-1}| = 1\} \subset \mathbb{Z}^2$$

úgy, hogy ha Γ nulla energiájú és $\text{Int } \Gamma \cap X \neq \emptyset$, akkor $|\Gamma| < 9$. (A trajektóriára „fölfűzött” 0 energiájú kontúrok hossza korlátos.)

Ekkor $P_4(s^0)$ -nak van végtelen összefüggő része, továbbá $P_4(s^0)$ pozitív sűrűségű halmaz: ha

$$T_M = \{x \in Z^2: \|x\| \leq M\},$$

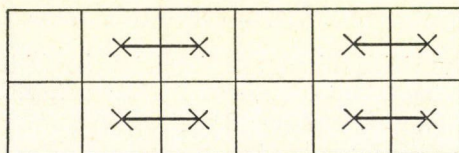
akkor

$$\liminf_{M \rightarrow \infty} \frac{|P_4(s^0) \cap T_M|}{|T_M|} > 0.$$

Peierls pontnak lenni annyit tesz, hogy a pont körüli „elégg hosszú” kontúrok energiája arányos a hosszukkal. Ha ez két dimenzióban egy periodikus alapállapot fölött igaz, akkor szükségképpen azok a pontok, amelyek körül van 0 energiájú kontúr, izolált szigeteket alkotnak — ez a 2. Tétel egy következménye. Érdekes, a disszertáción túlmutató kérdés, hogy mi a helyzet három és magasabb dimenzióban, és hogy a $v=2$ -re nyert eredmény kiterjeszthető-e nem-periodikus alapállapotokra. Ezt a kérdést úgy is megfogalmazhatjuk, hogy létezhet-e az egész rácsra kiterjedő részleges rendeződés nulla hőmérsékleten. Ha ugyanis egy alapállapotra teljesül a Peierls feltétel, és ugyanakkor minden pont körül van 0 energiájú kontúr, akkor a lokális mágnesezettség egyetlen pontban sem telítődhet, azaz $|\langle s(x) \rangle|$ nem tart 1-hez, ha a hőmérséklet 0-hoz tart. Ilyen két dimenzióban nem létezik, de olyan rétegesen frusztrált modell, amelyben fázisátmenet történik, és amelyben részlegesen és teljesen rendeződő sávok váltogatják egymást, van:

3. Tétel

Tekintsük azon kétdimenziós, nem feltétlenül periodikus frusztrált modelleket, amelyekben a frusztrált négyzetek (a $\varphi \subset F$ halmaz) első-szomszéd oszloppárokat képeznek, és két ilyen oszloppár között legalább egy frusztrálatlan négyzetoszlop húzódik (Longa, Oleš [II/10]).



Legyen s^0 az az alapállapot, melynek határát a frusztrált négyzetek közös függőleges élei alkotják (az s^0 határát mutatja az ábra). Akkor elég alacsony hőmérsékleten ($T=1/\beta$) létezik egy μ_{β, s^0} egyensúlyi állapot, amely s^0 -hoz tartozik a következő értelemben:

- (i) Bármilyen tipikus s konfigurációban $s=s^0$ egy végtelen összefüggő halmazon;
- (ii) ha x nem közös pontja négy frusztrált négyzetnek, akkor

$$s^0(x) \langle s(x) \rangle_{\mu_{\beta, s^0}} > 0$$

és tart 1-hez, ha β tart végtelenhez;

- (iii) ha x négy frusztrált négyzet közös pontja, akkor nulla hőmérsékleten

$$\langle s(x) \rangle_{\mu_{\infty, s^0}} = (1/\sqrt{5}) s^0(x).$$

Az első két állítás a Peierls-érveléssel szokásosan nyerhető eredmény (lásd III.0. pont), és implikálja, hogy létezik egy $\mu_{\beta, -s^0}$ állapot is, amely különbözik μ_{β, s^0} -tól. A két kitüntetett konfiguráció, $\pm s^0$, a két legmagasabb szimmetriájú alapállapot (az egyedüli alapállapotok, amelyek invariánsak a függőleges irányú eltolással szemben). A bizonyítás érdekessége az, hogy a Peierls érvelést anélkül kell végrehajtani, hogy a (III.1.5) Peierls feltétel teljesülne.

2. Az 1. Tétel bizonyítása

Az Állításnak megfelelően $0 \in P_L(s^0)$ valamilyen $L \geq 2v$ -re. Választunk egy véges $T \subset Z^v$ ponthalmazt úgy, hogy $0 \in T$ és, ha Γ olyan kontúr, amelyre

$$0 \in \text{Int} \Gamma \text{ és } \text{Int} \Gamma \cap \Delta T \neq \emptyset$$

akkor $|\Gamma| \geq L$. Itt

$$\Delta T = \{x \in T: d(x, Z^v - T) = 1\}.$$

(Tehát az origó körüli minden 0-energiájú kontúr T belsejébe esik. T ilyen például, ha $d(0, Z^v - T) \leq L/2(v-1)$.) Ha $V \supset T$ és V véges, akkor $G_V(s^0, T)$ jelöli a T -n fölött olyan konfigurációk összességét, amelyek kiterjeszthetők a Z^v -re alapállapotként úgy, hogy V -n kívül egybeesnek s^0 -lal. Nyilvánvaló, hogy $G_V(s^0, T) \subset G_{V'}(s^0, T)$ ha $V \subset V'$, másrészt $|G_V(s^0, T)| \leq 2^{|T|}$. Ezért ha V elég nagy ($V \supset V_0$, ahol V_0 valamilyen véges tartomány T körül), akkor $G_V(s^0, T) = G(s^0, T)$ független V -től.

(i) A bizonyítás első lépéseként belátjuk, hogy

$$G(s^0, T) \cap G(-s^0, T) = \emptyset.$$

Ha s^0 alapállapot, akkor $-s^0$ is az, és

$$G(-s^0, T) = -G(s^0, T) \equiv \{-s_T: s_T \in G(s^0, T)\}$$

a Hamilton függvénysszimmetriája miatt. Ha a fenti közös rész nem üres, akkor van olyan s^1 és s^2 alapállapot, melyekre teljesül, hogy

$$s^1 = s^2 = s^0 \quad \text{a } V\text{-n kívül}$$

$$s^1 = -s^2 \quad \text{a } T\text{-n belül}$$

Kell tehát, hogy legyen egy olyan Γ kontúr, amely a $\langle V, Z^v \rangle$ éleiből áll, teljesen körülveszi T -t, és 0 energiájú az s^1 alapállapothoz viszonyítva: ha Ω_1 az s^1 határa, akkor $k(\Gamma|\Omega_1) = 0$. Belátjuk, hogy ez ellentmond annak, hogy az s^0 -hoz viszonyított nulla energiájú kontúrok mind a T -n belül húzódnak. Legyen $\partial_1 \in \mathcal{Q}_0$ az a nulla energiájú kontúrhalmaz, amellyel Ω_0 -ból Ω_1 -et nyerhetjük: $\Omega_1 = \Omega_0 \circ \partial_1$. Akkor

$$0 = k(\Gamma|\Omega_1) = k(\Gamma|\Omega_0 \circ \partial_1) = k(\Gamma \circ \partial_1|\Omega_0) - k(\partial_1|\Omega_0) =$$

$$= k(\Gamma \circ \partial_1|\Omega_0) = k(\Gamma \circ \partial_1'|\Omega_0).$$

Itt használtuk a (III.1.7) azonosságot, és ∂_1' a ∂_1 -nek azon kontúrjaiból áll, amelyek kilépnek T -ből. Minthogy ezek a kontúrok nem vehetik körül az origót (0-energiájúak az s^0 -hoz viszonyítva), ezért $\Gamma \circ \partial_1'$ -ben van egy γ kontúr, amely az origót körbefogja. De $\gamma \cap \Gamma$ nem üres, és $k(\gamma|\Omega_0) = 0$, ami ellentmondás.

(ii) Legyen $V \supset V_0$, és $\mu_{\beta, s^0, V}$ jelölje a Gibbs valószínűségi sűrűséget $R(V, s^0)$ -on, β reciprok-hőmérséklet mellett. A (III.1.4) egyenlőségből

$$\mu_{\beta, s^0, V}(s) = Z_{\beta, s^0, V}^{-1} \exp\{-2\beta k(\partial|\Omega_0)\}, \quad (\text{III.2.1})$$

ha $s \in R(V, s^0)$ és $\partial = \Omega(s) \circ \Omega_0$. Tegyük fel, hogy valamely $\varepsilon < 1/2$ -re bizonyítani tudjuk olyan $\beta_0(\varepsilon)$ létezését, melyre fennáll V -től függetlenül, hogy

$$\mu_{\beta, s^0, V}(s_T \notin G(s^0, T)) < \varepsilon, \quad (\text{III.2.2})$$

hacsak $\beta > \beta_0(\varepsilon)$. (Itt s_T az $s \in R(V, s^0)$ megszorítása T -re.) Akkor

$$\mu_{\beta, s^0, V}(s_T \in G(s^0, T)) > 1 - \varepsilon \quad (\text{III.2.3})$$

és

$$\begin{aligned} \mu_{\beta, -s^0, V}(s_T \in G(s^0, T)) &= \\ &= \mu_{\beta, s^0, V}(s_T \in G(-s^0, T)) \equiv \mu_{\beta, s^0, V}(s_T \notin G(s^0, T)) < \varepsilon. \end{aligned} \quad (\text{III.2.4})$$

Itt az első egyenlőtlenség az (i) pont következménye. A (III.2.3) és (III.2.4) egyenlőtlenségek együtt bizonyítják, hogy $\beta > \beta_0(\varepsilon)$ -ra van két különböző egyensúlyi állapot. Hogy ezt az eredményt megkapjuk, be kell látnunk (III.2.2)-t. Legyen $\partial(s) = \Omega(s) \circ \Omega_0$; akkor

$$\begin{aligned} \{s \in R(V, s^0): s_T \notin G(s^0, T)\} &= \{s \in R(V, s^0): \partial(s) \\ &\text{tartalmaz olyan } \Gamma \text{ kontúrt, hogy} \\ k(\Gamma|\Omega_0) > 0 \text{ és } \text{Int}\Gamma \cap T \neq \emptyset\} &= \\ = \bigcup_{y \in T} \bigcup_{\substack{\Gamma \subset \langle V, Z^V \rangle: \\ y \in \text{Int } \Gamma, k(\Gamma|\Omega_0) > 0}} \{s \in R(V, s^0): \partial(s) \supset \Gamma\}. \end{aligned} \quad (\text{III.2.5})$$

Legyen

$$c(y) = \min_{\substack{\Gamma: k(\Gamma|\Omega_0) > 0 \\ y \in \text{Int } \Gamma}} \frac{k(\Gamma|\Omega_0)}{|\Gamma|}$$

és $c = \min_{y \in T} c(y)$. $c > 0$, mert T minden pontja Peierls pont. Minden kontúrra, amely (III.2.5)-ben előfordul, $k(\Gamma|\Omega_0) \equiv c|\Gamma|$. Ha

$$\mu_{\beta, s^0, V}(A_\Gamma) \equiv \sum_{\substack{s \in R(V, s^0) \\ \partial(s) \supset \Gamma}} \mu_{\beta, s^0, V}(s),$$

akkor (III.2.5)-ből

$$\begin{aligned} \mu_{\beta, s^0, V}(s_T \notin G(s^0, T)) &\equiv \sum_{y \in T} \sum_{\substack{\Gamma: y \in \text{Int } \Gamma \\ k(\Gamma|\Omega_0) > 0}} \mu_{\beta, s^0, V}(A_\Gamma) \\ &\equiv \sum_{y \in T} \sum_{\Gamma: y \in \text{Int } \Gamma} e^{-2\beta c|\Gamma|} \equiv |T| \sum_{l \geq 2\nu} l \cdot 3^l e^{-2\beta c l} \end{aligned}$$

hasonlóan a III.0. pont levezetéséhez. (Megjegyzendő, hogy (III.0.10) érvényes $\nu > 2$ -re is. Az erősebb

$$N_l \leq \frac{l}{2(\nu-1)} 3^l$$

állítás is igaz.) Tehát bármely $\varepsilon < 1/2$ -hez található β_0 úgy, hogy $\beta > \beta_0$ -ra (III.2.2) igaz, és ezzel a bizonyítás végére értünk.

Megjegyzés: A bizonyításban csak azok az alapállapotok játszottak szerepet, amelyek az s^0 -tól vagy $-s^0$ -tól véges tartományon különböznek. Ezeket két osztályba soroltuk, aszerint, hogy s_0 -lál vagy $-s^0$ -lál esnek-e egybe aszimptotikusan. Periodikus kölcsönhatás és periodikus s^0 alapállapot esetén a T -nél nagyobb, rögzített méretű kockákon a konfigurációkról egyértelműen eldönthető, hogy besorolhatók-e valamelyik osztályba, és ha igen, akkor melyikbe. Így tetszőleges konfigurációhoz definiálható egy „vastag” határ, amely a nem besorolható kockákból áll. Erre a határra teljesül a Peierls-feltétel, és megadható a szükséges entrópia-beecsés is. Így egy alternatív, Pirogov–Sinai típusú^[3] bizonyítást nyerünk. Minthogy célunk a frusztráció és ezen belül a nulla-energiájú kontúrok szerepének vizsgálata (lásd a fejezet hátralevő részét), egy ehhez illeszkedő bizonyítást választottunk.

3. A 2. Tétel bizonyítása

Kezdjük három lemmával.

1. Lemma

Z^v -ben legyenek $\Gamma_1, \dots, \Gamma_N$ véges kontúrok. Tetszőleges $N \geq 1$ -re

$$\Gamma_1 \circ \Gamma_2 \circ \dots \circ \Gamma_N = \partial(\text{Int } \Gamma_1 \circ \text{Int } \Gamma_2 \circ \dots \circ \text{Int } \Gamma_N).$$

Bizonyítás

$N=1$ -re az állítás a definíciók közvetlen következménye. Tehát, ha $\langle xy \rangle \in \Gamma$, akkor $x \in \text{Int } \Gamma$ és $y \notin \text{Int } \Gamma$ vagy fordítva. Legyen most $N > 1$. $\langle xy \rangle \in \Gamma_1 \circ \dots \circ \Gamma_N$ akkor és csak akkor, ha $\langle xy \rangle \in \Gamma_{i_k}$, $k=1, 2, \dots, m$, ahol m páratlan szám, és $\langle xy \rangle \notin \Gamma_j$ ha $j \neq i_k$ ($k=1, \dots, m$). Ez akkor és csak akkor teljesül, ha $x \in \text{Int } \Gamma_{i_k}$ és $y \notin \text{Int } \Gamma_{i_k}$ vagy fordítva, $k=1, 2, \dots, m$, és $\{x, y\} \subset \text{Int } \Gamma_j$ vagy $\{x, y\} \cap \text{Int } \Gamma_j = \emptyset$ ha $j \neq i_k$ ($k=1, \dots, m$). Tegyük fel, hogy $x \in \text{Int } \Gamma_{i_k}$ a k indexnek pontosan n különböző értékére, és $x \in \text{Int } \Gamma_j$ pontosan p számú j -re ($j \neq i_1, \dots, i_m$). Akkor x pontosan $n+p$ számú kontúr belső tartományában van benne. Másrészt, $y \in \text{Int } \Gamma_{i_k}$ a k index fennmaradó $m-n$ értékére, és $y \in \text{Int } \Gamma_j$ ugyanazon p számú j -re, melyre $x \in \text{Int } \Gamma_j$. Mindezt összevetve, y pontosan $m-n+p$ számú kontúr belsejében van benne. Mivel $n+p$ és $m-n+p$ paritása különböző, ezért x és y közül pontosan az egyik van bent az $\text{Int } \Gamma_1 \circ \dots \circ \text{Int } \Gamma_N$ halmazban, ez pedig ekvivalens azzal, hogy $\langle xy \rangle \in \partial(\text{Int } \Gamma_1 \circ \dots \circ \text{Int } \Gamma_N)$.

Azt mondjuk, hogy $\Gamma_1, \dots, \Gamma_N$ kontúrok *minimális gyűrűt* képeznek az origó körül, ha

$$0 \notin \bigcup_{i=1}^N \text{Int } \Gamma_i, \quad 0 \in \text{Int } \bigcup_{i=1}^N \Gamma_i, \quad \text{de } 0 \notin \text{Int } \bigcup_{i \neq j} \Gamma_i$$

bármely $j=1, \dots, N$ -re. Két dimenzióban egy minimális gyűrű kontúrjai indexelhetők ciklikusan, azaz úgy, hogy $\Gamma_i \cup \Gamma_{i+1}$ összefüggő, $i=1, 2, \dots, N$ ($N+1 \equiv 1$). A minimalitásból következik, hogy $\Gamma_i \cup \Gamma_j$ nem összefüggő, ha i és j nem egymást követő számok.

2. Lemma

A Z^2 -n legyen $\Gamma_1, \dots, \Gamma_N$ ($N \geq 3$) egy minimális gyűrű az origó körül, és tegyük föl, hogy $\text{Int } \Gamma_i \circ \text{Int } \Gamma_{i+1} \sqrt{2}$ -összefüggő minden i -re. Akkor $0 \in \text{Int } \Gamma$ valamilyen $\Gamma \subset \Gamma_1 \circ \Gamma_1 \circ \dots \circ \Gamma_N$ -re.

Bizonyítás

Legyen

$$Y_i = \{y_{i1} = 0, y_{i2}, \dots : |y_{ik} - y_{ik+1}| = 1\} \subset Z^2$$

egy olyan origóból kifutó trajektória, amelyre

$$Y_i \cap \bigcup_{j=1}^N \text{Int } \Gamma_j \subset \text{Int } \Gamma_i - \bigcup_{j \neq i} \text{Int } \Gamma_j.$$

Ilyen Y_i minden i -re létezik, a kontúrhalmoz minimalitása miatt. $Y_i \cup Y_{i+1}$ a Z^2 -t két darabra bontja. Az egyik, amelyet $(i, i+1)$ szektornak hívunk, nem tartalmaz pontot $\text{Int } \Gamma_j$ -ből, ha $j \neq i, i+1$; magát $Y_i \cup Y_{i+1}$ -et ide soroljuk. Bármilyen, az origóból kiinduló és az $(i, i+1)$ szektorban haladó trajektória metszi az

$$A_i \equiv \text{Int } \Gamma_i \circ \text{Int } \Gamma_{i+1} - \bigcup_{j \neq i, i+1} \text{Int } \Gamma_j$$

halmazt ($\text{Int } \Gamma_i \circ \text{Int } \Gamma_{i+1} \sqrt{2}$ -összefüggő!). Továbbá, $d(A_i, A_{i+1}) = 0$, mert $\text{Int } \Gamma_{i+1} - \bigcup_{j \neq i+1} \text{Int } \Gamma_j \subset A_i \cap A_{i+1}$. Ezért bármilyen, az origóból kiinduló trajektória metszi az

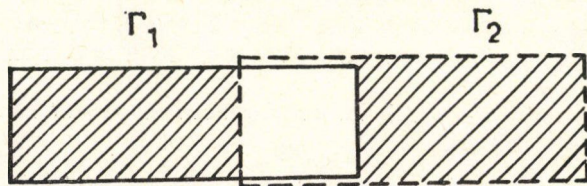
$$\bigcup_{i=1}^N A_i = \text{Int } \Gamma_1 \circ \dots \circ \text{Int } \Gamma_N$$

halmazt. Következik, hogy van olyan

$$\Gamma \subset \partial(\text{Int } \Gamma_1 \circ \dots \circ \text{Int } \Gamma_N),$$

melyre $0 \in \text{Int } \Gamma$. De az 1. Lemma szerint éppen ezt kellett bizonyítani.

Az olvasóban felmerülhet, hogy az $\text{Int } \Gamma_i \circ \text{Int } \Gamma_{i+1} \sqrt{2}$ -összefüggősége nem fölösleges megkötés-e. Tény, hogy ha $\Gamma_i \cup \Gamma_{i+1}$ összefüggő, akkor $\text{Int } \Gamma_i \cup \text{Int } \Gamma_{i+1} \sqrt{2}$ -összefüggő. A szimmetrikus differencia azonban nem feltétlenül, például



itt a belső tartományok szimmetrikus differenciája (besatírozva) távoli. A tétel bizonyításához szükségünk lesz arra, hogy az ilyen helyzeteket kiküszöböljük. A feldrajzolt példában Γ_1 és Γ_2 helyettesíthető az egyetlen $\Gamma = \partial(\text{Int } \Gamma_1 \cup \text{Int } \Gamma_2)$ kontúrral. Ha Γ_1 és Γ_2 0-energiájú, akkor Γ is 0-energiájú. Ennek bizonyítását és az eljárást általános Γ_1 és Γ_2 esetén tartalmazza a következő lemma.

3. Lemma

Z^v -ben Γ_1 és Γ_2 legyenek 0-energiájú kontúrok Ω_0 -hoz viszonyítva. Belső tartományaik szimmetrikus differenciáját felbonthatjuk úgy, hogy

$$\text{Int } \Gamma_1 \circ \text{Int } \Gamma_2 = C_1 \cup C_2,$$

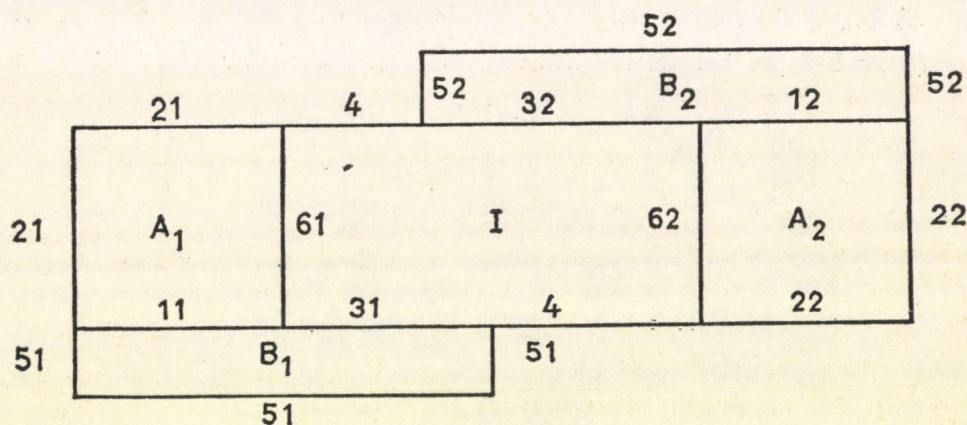
ahol vagy $C_2 = \emptyset$ vagy $d(C_1, C_2) > 1$. Legyen

$$A_i = C_i \cap \text{Int } \Gamma_1 - \text{Int } \Gamma_2, \quad B_i = C_i \cap \text{Int } \Gamma_2 - \text{Int } \Gamma_1 \quad (i = 1, 2)$$

$$I = \text{Int } \Gamma_1 \cap \text{Int } \Gamma_2.$$

Akkor

$$k(\partial(A_1 \cup I \cup B_2) | \Omega_0) = k(\partial(A_2 \cup I \cup B_1) | \Omega_0) = 0.$$



$$\Gamma_1 = \partial(A_1 \cup I \cup A_2)$$

$$\Gamma_2 = \partial(B_1 \cup I \cup B_2)$$

$$C_1 = A_1 \cup B_1$$

$$C_2 = A_2 \cup B_2$$

Bizonyítás

Alkalmazzuk a következő jelöléseket:

$$x_{1i} = \langle A_i, B_i \rangle \quad x_{2i} = \langle A_i, Z^v - (\text{Int } \Gamma_1 \cup \text{Int } \Gamma_2) \rangle$$

$$x_{3i} = \langle I, B_i \rangle \quad x_{4i} = \langle I, Z^v - (\text{Int } \Gamma_1 \cup \text{Int } \Gamma_2) \rangle$$

$$x_{5i} = \langle Z^v - (\text{Int } \Gamma_1 \cup \text{Int } \Gamma_2), B_i \rangle \quad x_{6i} = \langle A_i, I \rangle.$$

Így 11 ($i=1, 2$) páronként nem-metsző élhalmazt kaptunk. Segítségükkel felírhatók a következő egyenletek. ($d(C_1, C_2) > 1$ miatt nincs él A_1 és A_2 , B_1 és B_2 , A_1 és B_2 ,

A_2 és B_1 között.)

$$\begin{aligned}\Gamma_1 &= X_{11} \cup X_{12} \cup X_{21} \cup X_{22} \cup X_{31} \cup X_{32} \cup X_4 \\ \Gamma_2 &= X_{11} \cup X_{12} \cup X_4 \cup X_{51} \cup X_{52} \cup X_{61} \cup X_{62} \\ \partial(A_1 \cup I \cup B_2) &= X_{11} \cup X_{12} \cup X_{21} \cup X_{31} \cup X_4 \cup X_{52} \cup X_{62} \\ \partial(A_2 \cup I \cup B_1) &= X_{11} \cup X_{12} \cup X_{22} \cup X_{32} \cup X_4 \cup X_{51} \cup X_{61}\end{aligned}$$

Az energia a diszjunkt éhalmazokon additív, ezért

$$k(\partial(A_1 \cup I \cup B_2) | \Omega_0) + k(\partial(A_2 \cup I \cup B_1) | \Omega_0) = k(\Gamma_1 | \Omega_0) + k(\Gamma_2 | \Omega_0) = 0.$$

Mint hogy $k(\partial | \Omega_0)$ nem negatív, az állítás ezzel bizonyított.

Most rátérünk a tétel bizonyítására.

A) Tegyük föl először, hogy $P_4(s^0)$ minden maximális összefüggő része véges.

(i) Az III.1 pontbeli állítás értelmében $0 \in P_{L,c}(s^0)$, ahol $L \geq 4$ és $c > 0$. Legyen

$$K = \max \{L+1, L/2c, 9/2c^2\} \quad (\text{III.3.1})$$

(ahol 9 a tétel kimondásában szerepelt) és

$$T_K = \{x \in Z^v : \|x\| \leq K\}.$$

Ha a feltevés igaz, akkor található $V \supset T_K$, V véges és összefüggő, hogy

$$\delta V \cap P_4(s^0) \equiv \{x \in Z^v : d(x, V) = 1\} \cap P_4(s^0) = \emptyset.$$

Ezért tetszőleges $x \in \delta V$ pont körül található egy nulla-energiájú kontúr, $\Gamma(x)$. Mármint, $\|x\| > L$ és $\delta V \sqrt{2}$ -összefüggő; innen következik, hogy

$$0 \notin \bigcup_{x \in \delta V} \text{Int } \Gamma(x)$$

de

$$0 \in \text{Int } \bigcup_{x \in \delta V} \Gamma(x).$$

Ha $\{\Gamma(x) : x \in \delta V\}$ nem minimális gyűrű az origó körül, akkor azzá tehető néhány kontúr elhagyásával. Legyen

$$S^{(0)} = \{\Gamma_1^{(0)}, \dots, \Gamma_{N_0}^{(0)}\} \subset \{\Gamma(x) : x \in \delta V\}$$

egy minimális gyűrű, ciklikus indexeléssel.

(ii) Tegyük fel, hogy van olyan i , amelyre $\text{Int } \Gamma_i^{(0)} \circ \text{Int } \Gamma_{i+1}^{(0)}$ nem $\sqrt{2}$ -összefüggő. Alkalmazzuk a 3. Lemmát a $\Gamma_1 = \Gamma_i^{(0)}, \Gamma_2 = \Gamma_{i+1}^{(0)}$ szereposztással. Világos, hogy

$$d(\text{Int } \Gamma_{i+1}^{(0)}, \text{Int } \Gamma_{i+2}^{(0)}) \leq \sqrt{2}, d(\text{Int } \Gamma_i^{(0)}, \text{Int } \Gamma_{i+2}^{(0)}) > \sqrt{2},$$

és ezért

$$d(\text{Int } \Gamma_i^{(0)} \circ \text{Int } \Gamma_{i+1}^{(0)}, \text{Int } \Gamma_{i+2}^{(0)}) \leq \sqrt{2}.$$

Most tekintsük a következő felbontást:

$$\text{Int } \Gamma_i^{(0)} \circ \text{Int } \Gamma_{i+1}^{(0)} = C_1 \cup C_2,$$

ahol C_1 a szimmetrikus differenciának olyan maximális összefüggő darabja, amely $\text{Int } \Gamma_{i+2}^{(0)}$ -től $\sqrt{2}$ -nél nem távolabb esik. C_2 nem üres, és $d(C_1, C_2) > 1$. A 3. Lemma jelöléseit alkalmazva $C_1 = A_1 \cup B_1$, $C_2 = A_2 \cup B_2$, ahol

$$A_1 = C_1 \cap \text{Int } \Gamma_i^{(0)} - \text{Int } \Gamma_{i+1}^{(0)}$$

$$B_1 = C_1 \cap \text{Int } \Gamma_{i+1}^{(0)} - \text{Int } \Gamma_i^{(0)}$$

$$A_2 = C_2 \cap \text{Int } \Gamma_i^{(0)} - \text{Int } \Gamma_{i+1}^{(0)}$$

$$B_2 = C_2 \cap \text{Int } \Gamma_{i+1}^{(0)} - \text{Int } \Gamma_i^{(0)}.$$

Itt B_1 nem üres halmaz, mert tartalmazza az $\text{Int } \Gamma_i^{(0)} \circ \text{Int } \Gamma_{i+1}^{(0)}$ -nek az $\text{Int } \Gamma_{i+2}^{(0)}$ -től $\sqrt{2}$ -nél nem távolabb eső pontjait. Fennáll, hogy $\partial(A_2 \cup I \cup B_1)$ nulla-energiájú és összefügg $\Gamma_{i+2}^{(0)}$ -vel, ezért van egy 0-energiájú és $\Gamma_{i+2}^{(0)}$ -vel összefüggő $\Gamma' \subset \partial(A_2 \cup I \cup B_1)$ kontúr is. Γ' összefügg $\Gamma_i^{(0)}$ -vel is, sőt, van közös részük. Valóban, $\Gamma' \subset \Gamma_i^{(0)} \cup \text{Int } \Gamma_{i+1}^{(0)}$, ezért ha $\Gamma' \cap \Gamma_i^{(0)} = \emptyset$, akkor $\Gamma' = \Gamma_{i+1}^{(0)}$ lenne ($\Gamma' \subseteq \Gamma_{i+1}^{(0)}$ nem lehet, mert kontúrnak nincs valódi része, ami kontúr). Ez viszont nem igaz, mert

$$\text{Int } \Gamma' \circ \text{Int } \Gamma_i^{(0)} \subset (A_2 \cup I \cup B_1) \circ (A_1 \cup I \cup A_2) = A_1 \cup B_1 = C_1$$

$$\subseteq C_1 \cup C_2 = \text{Int } \Gamma_{i+1}^{(0)} \circ \text{Int } \Gamma_i^{(0)}.$$

Most $S^{(0)}$ -ban helyettesítsük $\Gamma_{i+1}^{(0)}$ -et Γ' -vel. Így nyerjük az S' kontúrhalmazt, mely a következő tulajdonságokkal bír:

1. $k(\Gamma | \Omega_0) = 0$ ha $\Gamma \in S'$,
2. $0 \notin \bigcup_{\Gamma \in S'} \text{Int } \Gamma$ de $0 \in \text{Int } \bigcup_{\Gamma \in S'} \Gamma$, és
3. $\bigcup_{\Gamma \in S'} \Gamma \subset \bigcup_{x \in \partial V} \Gamma(x)$.

(iii) Legyen $S^{(1)} \subset S'$ egy minimális gyűrű az origó körül. (Könnyen igazolható, hogy $S^{(1)} = S' = S^{(0)} - \{\Gamma_{i+1}^{(0)}\} \cup \{\Gamma'\}$ vagy $S^{(1)} = S^{(0)} - \{\Gamma_i^{(0)}, \Gamma_{i+1}^{(0)}\} \cup \{\Gamma'\}$.) Bevezetjük az S kontúrhalmazhoz rendelt $F[S]$ mennyiséget:

$$F[S] = \left| \bigcup_{\Gamma \in S} \Gamma \right| + \left| \bigcup_{\Gamma \in S} \text{Int } \Gamma \right|$$

és belátjuk, hogy

$$F[S^{(1)}] < F[S^{(0)}]. \quad (\text{III.3.2})$$

Mivel $F[S^{(1)}] \leq F[S']$, azért elég megmutatni, hogy

$$F[S'] < F[S^{(0)}].$$

Ez pedig teljesül, ha

$$|\Gamma_{i+1}^{(0)} - \Gamma_i^{(0)} - \Gamma_{i+2}^{(0)} - \Gamma'| + |\text{Int } \Gamma_{i+1}^{(0)} - \text{Int } \Gamma_i^{(0)} - \text{Int } \Gamma_{i+2}^{(0)} - \text{Int } \Gamma'| \geq 1.$$

Itt esetsztékválasztással bizonyítunk. C_2 nem üres: tegyük föl először, hogy A_2 nem üres. Legyen, mint a 3. Lemmában,

$$I = \text{Int } \Gamma_i^{(0)} \cap \text{Int } \Gamma_{i+1}^{(0)}.$$

I nem üres, mert ellenkező esetben $\text{Int } \Gamma_i^{(0)} \circ \text{Int } \Gamma_{i+1}^{(0)} = \text{Int } \Gamma_i^{(0)} \cup \text{Int } \Gamma_{i+1}^{(0)}$, amely $\sqrt{2}$ -összefüggő. Továbbá, van él A_2 és I között, azaz $x_{62} = \langle A_2, I \rangle \neq \emptyset$: ha nem lenne ilyen él, akkor $d(A_1, A_2) = 1$ kellene legyen, hiszen $A_1 \cup I \cup A_2 = \text{Int } (\Gamma_i^{(0)})$ összefüggő; azonban $d(A_1, A_2) \equiv d(C_1, C_2) > 1$. A 3. Lemma Γ_1 -re, Γ_2 -re és $\partial(A_2 \cup I \cup B_1)$ -re felírt egyenletei azt mutatják, hogy

$$x_{62} \cap \Gamma_i^{(0)} = x_{62} \cap \Gamma' = \emptyset, \quad x_{62} \subset \Gamma_{i+1}^{(0)}.$$

Világos az is, hogy $x_{62} \cap \Gamma_{i+2}^{(0)} = \emptyset$ (mert $d(A_2, \text{Int } \Gamma_{i+2}^{(0)}) > 1$). Következik, hogy

$$|\Gamma_{i+1}^{(0)} - \Gamma_i^{(0)} - \Gamma_{i+2}^{(0)} - \Gamma'| \equiv |x_{62}| \equiv 1.$$

Ha A_2 üres, akkor B_2 nem üres. Ekkor $d(B_1 \cup I, B_2) = 1$, mert $B_1 \cup I \cup B_2 = \text{Int } \Gamma_{i+1}^{(0)}$ összefüggő. Szükségképpen $d(I, B_2) = 1$, mert vagy $B_1 = \emptyset$ vagy $d(B_1, B_2) \equiv d(C_1, C_2) > 1$. Emiatt $B_2 \not\subset \text{Int } \Gamma_{i+2}^{(0)}$ (utóbbinak nem lehet I -hez 1-közeli pontja), ugyanakkor

$$B_2 \subset \text{Int } \Gamma_{i+1}^{(0)} \quad \text{és} \quad B_2 \cap \text{Int } \Gamma_i^{(0)} = B_2 \cap \text{Int } \Gamma' = \emptyset.$$

Következik, hogy

$$|\text{Int } \Gamma_{i+1}^{(0)} - \text{Int } \Gamma_i^{(0)} - \text{Int } \Gamma_{i+2}^{(0)} - \text{Int } \Gamma'| \equiv 1.$$

Ezzel igazoltuk a (III.3.2) egyenlőtlenséget.

Az (ii) pontban megadtunk egy transzformációt, amely az $S^{(k)}$ minimális gyűrűből $S^{(k+1)}$ -re vezet. Minthogy $F[S^{(k)}]$ pozitív és minden lépésben legalább eggyel csökken, véges számú lépés után a következő tulajdonságú S kontúrhalmazzra jutunk:

1. $S = \{\Gamma_1, \dots, \Gamma_N\}$ 0-energiájú kontúrok minimális gyűrűje az origó körül

$$2. \quad \bigcup_{i=1}^N \Gamma_i \subset \bigcup_{x \in \partial V} \Gamma(x)$$

3. ciklikus indexelés esetén $\text{Int } \Gamma_i \circ \text{Int } \Gamma_{i+1} \sqrt{2}$ -összefüggő minden i -re.

(iv) Legyen $x \in \mathbb{Z}^2$, Γ 0-energiájú kontúr az x pont körül, és

$$\varrho = \min_{y \in \text{Int } \Gamma} \|y\|.$$

Akkor

$$\varrho \equiv c(\|x\| - (L+3)/2).$$

Ez következik az alábbi két egyenlőtlenségéből:

$$2(\|x\| - \varrho + 1) + 2 \equiv |\Gamma| < \frac{2(1-c)}{c} \varrho + \frac{2}{c} + L + 7.$$

A bal oldali egyenlőtlenség nyilvánvaló, a jobb oldali a III.1. pontbeli Állítás következménye. Az Állítás jelölését használva, $\varrho = \varrho(\Gamma, 0)$.

Ha $x \in \delta V$, akkor $\|x\| \cong K+1$, és K (III.3.1) szerinti választása miatt

$$\varrho(\Gamma(x), 0) \cong Kc/2.$$

Következésképpen, ha

$$\gamma \subset \bigcup_{x \in \delta V} \Gamma(x)$$

egy kontúr az origó körül, akkor

$$|\gamma| \cong 4(Kc - 1) \cong L,$$

ahol az utóbbi egyenlőtlenség (III.3.1) és $L \cong 4$ következménye.

(v) Most befejezzük a tétel első állításának bizonyítását. Az (i)–(iii) pontokban leírt eljárás végén kapott minimális gyűrű legalább két elemű, $|S| = N \cong 2$. Először fölteszük, hogy $N = 2m$, és $m \cong 2$. Legyen

$$\partial_e = \Gamma_2 \circ \Gamma_4 \circ \dots \circ \Gamma_N$$

és

$$\partial_o = \Gamma_1 \circ \Gamma_3 \circ \dots \circ \Gamma_{N-1}.$$

Mivel S minimális gyűrű, azért mind ∂_e , mint ∂_o valójában diszjunkt kontúrok uniója, és így $k(\partial_e|\Omega_0) = k(\partial_o|\Omega_0) = 0$. Úgyszintén, a (III.1.7) azonosság alkalmazásával

$$k(\partial_e \circ \partial_o|\Omega_0 \circ \partial_e) = k(\partial_o|\Omega_0) - k(\partial_e|\Omega_0) = 0.$$

Ezért, ha $\gamma \subset \partial_e \circ \partial_o$ egy origó körüli kontúr — és ilyen létezik a 2. Lemma szerint —, akkor

$$k(\gamma|\Omega_0 \circ \partial_e) = 0.$$

Tekintsük most a $\gamma \circ \partial_e$ határt. Mivel $0 \in \text{Int } \gamma$ és $0 \notin \text{Int } \partial_e$, azért

$$0 \in \text{Int } \gamma \circ \text{Int } \partial_e.$$

Ez azt jelenti, hogy az origót körülveszi egy

$$\gamma' \subset \gamma \circ \partial_e = \partial(\text{Int } \gamma \circ \text{Int } \partial_e)$$

kontúr. γ' nulla-energiájú Ω_0 fölött:

$$0 \cong k(\gamma'|\Omega_0) \cong k(\gamma \circ \partial_e|\Omega_0) = k(\partial_e|\Omega_0) + k(\gamma|\Omega_0 \circ \partial_e) = 0.$$

Ez azonban ellentmond $0 \in P_L(s^0)$ -nak, mivel (iv) szerint $|\gamma'| \cong L$.

Legyen most $N \cong 3$ páratlan szám. Az S kontúrjainak ciklikus indexelését kezdjük úgy, hogy

$$\text{Int } \Gamma_1 \cap X \neq \emptyset$$

legyen (X a tétel kimondásában szereplő trajektória). Ezúttal

$$\partial_e = \Gamma_2 \circ \Gamma_4 \circ \dots \circ \Gamma_{N-1}$$

ismét diszjunkt kontúrok uniója, és így $k(\partial_e|\Omega_0)=0$;

$$\partial_0 = \Gamma_1 \circ \Gamma_3 \circ \dots \circ \Gamma_N$$

energiájára pedig a következő becslésünk van:

$$0 \leq k(\partial_0|\Omega_0) = k(\Gamma_1 \circ \Gamma_N|\Omega_0) = k(\Gamma_1|\Omega_0 \circ \Gamma_N) < \vartheta.$$

Eszerint, ha $\gamma \subset \partial_e \circ \partial_0$ egy origó körüli kontúr, akkor

$$\begin{aligned} 0 \leq k(\gamma|\Omega_0 \circ \partial_e) &\leq k(\partial_e \circ \partial_0|\Omega_0 \circ \partial_e) \\ &= k(\partial_0|\Omega_0) < \vartheta. \end{aligned}$$

Ha pedig $\gamma' \subset \gamma \circ \partial_e$ az origó körüli kontúr, akkor

$$0 \leq k(\gamma'|\Omega_0) \leq k(\gamma \circ \partial_e|\Omega_0) = k(\gamma|\Omega_0 \circ \partial_e) < \vartheta.$$

Másrészt, $|\gamma'| \geq 4(Kc-1)$ a (iv) pont szerint, és így

$$\frac{k(\gamma'|\Omega_0)}{|\gamma'|} < \frac{\vartheta}{4(Kc-1)} \leq c$$

(a második egyenlőtlenség (III.3.1)-ből és $L \geq 4$ -ből adódik). Ez ismét ellentmond $0 \in P_{L,c}(s^0)$ -nak.

Hátravan az $N=2$ eset. Ha $0 \in \text{Int}(\Gamma_1 \circ \Gamma_2)$, akkor alkalmazható a páros N -re elmondott gondolatmenet. Ha $0 \notin \text{Int}(\Gamma_1 \circ \Gamma_2)$ és $|\Gamma_1| < \vartheta$, akkor könnyen belátható, hogy Γ_1 módosítható egy olyan Γ'_1 kontúrrá, amelyre $0 \in \text{Int}(\Gamma'_1 \circ \Gamma_2)$, $|\Gamma'_1| < \vartheta$ és $\text{Int} \Gamma'_1 \subset \text{Int} \Gamma_1$. Utóbbiból következik, hogy $\varrho(\Gamma'_1, 0) \geq Kc/2$; ha $\partial_e = \Gamma_2$ és $\partial_0 = \Gamma'_1$, akkor megismételhető a páratlan N -re elmondott érvelés. Ezzel bebizonyítottuk, hogy $P_4(s^0)$ -nak kell legyen végtelen összefüggő tartománya.

B) Bizonyítjuk, hogy $P_4(s^0)$ pozitív sűrűségű, azaz

$$\liminf_{M \rightarrow \infty} \frac{|P_4(s^0) \cap T_M|}{|T_M|} > 0.$$

Könnyen belátható, hogy ez igaz lesz, ha

$$\liminf_{M \rightarrow \infty} \frac{|P_4(s^0) \cap \delta T_M|}{|\delta T_M|} > 0. \quad (\text{III.3.3})$$

Itt

$$\delta T_M = \{x \in Z^2 : d(x, T_M) = 1\} = \{x \in Z^2 : \|x\| = M+1\}.$$

Tegyük fel, hogy (III.3.3) nem igaz. Akkor van az egészeknek egy olyan növekvő sorozata, $0 < K_1 < K_2 < \dots$, melyre

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|P_4(s^0) \cap \delta T_{K_n}|}{|\delta T_{K_n}|} = 0.$$

Válasszuk K -t (III.3.1) szerint, és legyen

$$\varepsilon < \frac{c}{4} \left(c - \frac{1}{K} \right).$$

Van olyan $n_0 = n_0(\varepsilon)$, hogy

$$|P_4(s^0) \cap \delta T_{K_n}| < 4\varepsilon K_n,$$

ha $n \geq n_0$. Válasszuk $n \geq n_0$ -t olyan nagynak, hogy $K_n \geq K$ legyen. Jelölje x_1, x_2, \dots, x_m a $P_4(s^0) \cap \delta T_{K_n}$ pontjait (feltehetjük, hogy ez nem üres halmaz, különben A) szerint ellentmondásra jutunk). Az x_i -t körülvevő elemi kontúr, $\partial(x_i)$, pozitív energiájú; továbbá

$$\partial(x_i) \cap \partial(x_j) = \emptyset \quad (i \neq j)$$

és

$$\sum_{i=1}^m |\partial(x_i)| = 4m = 4|P_4(s^0) \cap \delta T_{K_n}| < 16\varepsilon K_n.$$

Minden $x \in \delta T_{K_n}$ ponthoz válasszunk egy öt körülvevő $\Gamma(x)$ kontúrt: ez legyen 0-energiájú, ha ilyen létezik, és legyen $\partial(x_i)$, ha $x = x_i, i = 1, \dots, m$. Végezzük el ezzel a kontúrkészlettel az A) pontban leírt eljárást. Miközben előállítunk egy origó körüli 0-energiájú minimális gyűrűt, a $\partial(x_i)$ kontúrok egynémelyikét elhagyhatjuk. Ha a minimális gyűrű tartalmazza $\partial(x_i)$ -t, akkor ezt a helyettesítő transzformáció, (A. ii), nem változtatja meg. Így a végső minimális gyűrűben, $S = \{\Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma_N\}$, a kontúrok összenergiája $\leq 16\varepsilon K_n$ ha van köztük $\partial(x_i)$, és nulla, ha mindet elhagytuk. Utóbbi esetben az ellentmondást A) alapján kapjuk meg. Ha van $\partial(x_i)$ valamely i -re az S -ben, akkor válasszuk úgy a számozást, hogy $\Gamma_1 = \partial(x_i)$ legyen. Bevezetve a

$$\partial_e = \circ\{\Gamma_i : i \text{ páros és } k(\Gamma_i|\Omega_0) = 0\}$$

$$\partial_o = \circ\{\Gamma_i : i \text{ páratlan vagy } k(\Gamma_i|\Omega_0) > 0\}$$

felbontást, látható, hogy

$$k(\partial_e|\Omega_0) = 0, \quad k(\partial_o|\Omega_0) \leq 16\varepsilon K_n.$$

Ha a

$$\gamma' \subset \bigcup_{x \in \delta T_{K_n}} \Gamma(x)$$

origót körülvevő kontúrt ugyanúgy konstruáljuk meg ∂_e és ∂_o -ból, mint az A) pontban, akkor

$$|\gamma'| \geq 4(K_n c - 1) \geq L$$

és

$$0 \leq k(\gamma'|\Omega_0) \leq 16\varepsilon K_n.$$

Ezért

$$\frac{k(\gamma'|\Omega_0)}{|\gamma'|} \leq \frac{4\varepsilon K_n}{K_n c - 1} < c,$$

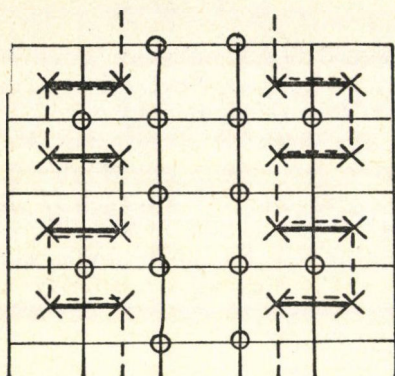
ami ellentmond annak, hogy $0 \in P_{L,c}(s^0)$.

Ezzel a 2. Tétel bizonyítását befejeztük.

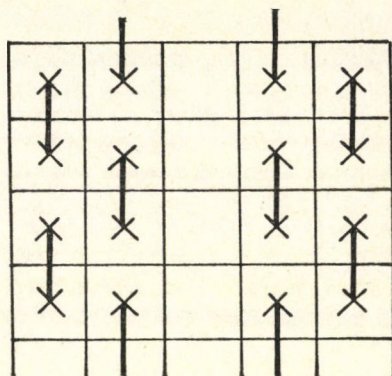
Miként ezt a III.1. pontban említettük, érdekes volna tudni, hogy egy hasonló eredmény igaz-e három és magasabb dimenzióban. Az előző bizonyítás azért nem alkalmazható három dimenzióra, mert lényegesen kihasználja azt, hogy egy minimális gyűrű kontúrjai sorbarendezhetők úgy, hogy csak a szomszédosak függnek össze.

4. A Longa—Oleś modell és a 3. Tétel bizonyítása

A rétegesen frusztrált kétdimenziós modelleket a II. fejezetben megemlítettük. A tételben szereplő modellek közül a legegyszerűbb periodikusak szabadenergiája a dimer módszerrel^[7] kiszámolható, és a hőmérséklet függvényében szinguláris valamilyen $T = T_c(\varphi) > 0$ értéknél. Ebből nem következik szükségszerűen, hogy $T < T_c(\varphi) =$ re több egyensúlyi fázis van; ezt az alábbiakban fogjuk bizonyítani. A tételben szereplő s^0 alapállapotra nem teljesül a Peierls feltétel: egy kontúr a frusztrált négyzetek közepeit összekötő cikk-cakk vonalban tetszőlegesen hosszan haladhat anélkül, hogy a $k(\Gamma|\Omega_0)$ -ba adott járulék növekednék:



a)



b)

A jobb oldali ábra az $\Omega_0 \circ \Gamma$ határt mutatja. Mielőtt a pontos bizonyítást megadnánk, hadd érzékeltessük „fizikai” érveléssel a problémát és megoldását. A φ négyzethalmaz a kölcsönhatások egy „gauge-ekvivalens” osztályához tartozik. Egy reprezentáns kölcsönhatás például olyan, hogy a frusztrált négyzetek közös függőleges élein $J_{xy} = -1$, az egyéb kötések értéke $+1$. Akkor a tétel állításában szereplő s^0 alapállapot a csupa $+$ konfiguráció. Ha a negatív élek menti nem-szomszédos rácspontokban megfordítjuk a spint, újabb alapállapotokat kapunk. Az s^0 -ból így származtatható alapállapotok családját jelölje F_+ . Hasonlóan, a $-s^0$ -ból képezhető család $F_- = -F_+$. Ha az F_+ -on belül kiszámoljuk egy spin átlagértékét, azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \langle s(x) \rangle &= 1/\sqrt{5}, \text{ ha } x \text{ közös pontja négy frusztrált négyzetnek} \\ &= 1, \text{ ha } x \text{ nem közös pontja négy frusztrált négyzetnek} \end{aligned}$$

(előbbi a bizonyítás során megmutatjuk). F_{\pm} -ban tehát hosszú távú rend van és pozitív, illetve negatív mágnesezettség. Azt várjuk, hogy F_+ és F_- rendezett fázisok folytatásai nulla hőmérsékletre. Van azonban egy harmadik alapállapot halmaz is, F_0 . Az ebben levő alapállapotokat $\pm s^0$ -ból teljes spin-sávok megfordításával lehet kapni (lásd pl. az (a) ábrán a bekarikázott rácspontokat). Ez a transzformáció végtelesen sok spint érint, de végrehajtható lokális transzformációk sorozataként. Az első transzformáció energiaköltsége arányos a sáv szélességével, a további transzformációk ingyeneseek. Tetszőlegesen kis pozitív hőmérsékleten ezek a gerjesztések hozzáférhetők,

és csatornát teremtenek a feltételezett két rendezett fázis között. Minthogy e gerjesztések relatív súlya a termodinamikai limeszben nullához tart, nem törik le a rendet: Egyszerű becslés szerint egy N pontszámú négyzetben aszimptotikusan

$$|F_{tot}| \equiv |F_+| + |F_-| + |F_0| = 2(1 + c^{\sqrt{N}})^{\sqrt{N}/m},$$

és

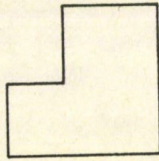
$$|F_+| = |F_-| = c^{N/m},$$

ha a modell periodikus, és vízszintes irányban a periódus m . ($c = (1 + \sqrt{5})/2$, lásd később.) E modellben zérusponthi entrópia van, alacsony hőmérsékleteken az entrópia megbecsülhető a zérusponthi értékkel. Ha nincs rendeződés, és egyetlen fázis van, akkor ennek entrópiája $\sim \ln |F_{tot}|$. Ha van rendezett fázis, és ez F_+ -hoz tart $T \rightarrow 0$ esetén, akkor az entrópia $\sim \ln |F_+|$. A különbség

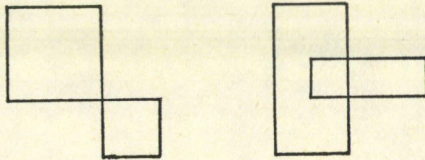
$$\ln |F_{tot}| - \ln |F_+| = \ln 2 + \frac{\sqrt{N}}{m} \ln(1 + c^{-\sqrt{N}}) \rightarrow \ln 2$$

a termodinamikai limeszben. A „keverési entrópia” tehát elhanyagolható, ezért maradhat meg a rend pozitív hőmérsékleten.

Most rátérünk a pontos bizonyításra. Ehhez kissé módosítjuk a kontúr III.1-beli definícióját. A továbbiakban kényelmesebb kontúrunk definiálni Q_0 maximális összefüggő részhalmazait. Így az egyszerű zárt töröttvonalakon



kívül egy önmagát metsző vonal,



is kontúrt reprezentál a duális rácson. Az l hosszúságú kontúrok számára megadott (III.0.10) becslés helyett most $N_l \equiv (l/2)4^l$ áll. Legyen ∂ az $\Omega(s) = \Omega_0 \circ \partial$ által definiálva, és bevezetjük a valószínűségi sűrűség rövid jelölését, $P = \mu_{s\beta, o, v}$. Rögzítünk valamilyen ε -t, $0 < \varepsilon < 1$, és legyen x tetszőleges pont a véges V tartományban. Ha $P(\Gamma)$ annak a valószínűségét jelöli, hogy Γ egy maximális összefüggő komponens ∂ -ban ($P(\Gamma) < P(A_\Gamma)!$), akkor

$$\begin{aligned} P(s(x) = -s^0(x)) &\equiv P(x \in \text{Int } \partial) \\ &\equiv \sum_{\Gamma: x \in \text{Int } \Gamma} P(\Gamma) = A_x(\varepsilon, >) + A_x(\varepsilon, <) + A_x(0), \end{aligned}$$

ahol

$$A_x(\varepsilon, >) = \sum_{\substack{\Gamma: x \in \text{Int } \Gamma \\ k_\Gamma \equiv \varepsilon |\Gamma|}} P(\Gamma)$$

$$A_x(\varepsilon, <) = \sum_{\substack{\Gamma: x \in \text{Int } \Gamma \\ 0 < k_\Gamma < \varepsilon |\Gamma|}} P(\Gamma)$$

$$A_x(0) = \sum_{\substack{\Gamma: x \in \text{Int } \Gamma \\ k_\Gamma = 0}} P(\Gamma).$$

(Itt és a továbbiakban a rövidített $k_\Gamma \equiv k(\Gamma|\Omega_0)$, $k_\partial \equiv k(\partial|\Omega_0)$ jelölést használjuk.) $A_x(\varepsilon, >)$ becslése ugyanúgy történik, mint az eredeti Peierls érvelésben ((III.0.11) képlet):

$$A_x(\varepsilon, >) \leq \sum_{l \geq 4} (l/2) 4^l e^{-2\beta \varepsilon^l}, \quad (\text{III.4.1})$$

a másik két tag becslését viszont ki kell dolgoznunk.

Jelölje $\hat{\partial}$ a duális rács azon pontjainak halmazát, amelyeken ∂ átmegy, és legyen

$$z = e^{-2\beta}.$$

Akkor

$$P(\Gamma) = z^{k_\Gamma} \sum_{\partial': \partial' \cap \Gamma = \emptyset} z^{k_{\partial'}} / \sum_{\partial''} z^{k_{\partial''}}. \quad (\text{III.4.2})$$

Ebben a képletben a $\hat{\partial}' \cap \hat{\Gamma} = \emptyset$ megszorítás azt fejezi ki, hogy Γ nem függ össze ∂' -vel;

$$k_\Gamma + k_{\partial'} = k_{\Gamma \cup \partial'} = k_\partial$$

az s konfiguráció s^0 -hoz viszonyított energiájának fele (v. ö. (III.1.4) képlet); a nevező az s^0 peremfeltétel melletti állapotösszeg. Nyilvánvalóan fennáll, hogy

$$\sum_{\partial''} z^{k_{\partial''}} \equiv \sum_{\partial': \hat{\partial}' \cap \hat{\Gamma} = \emptyset} z^{k_{\partial'}} \sum_{\partial: \hat{\partial} \subset \hat{\Gamma}} z^{k_{\partial}},$$

minthogy $\partial' \cup \partial$ az adott megszorítások mellett egy lehetséges ∂'' a bal oldalon. Innen azt kapjuk, hogy

$$P(\Gamma) \leq z^{k_\Gamma} / \sum_{\partial: \hat{\partial} \subset \hat{\Gamma}} z^{k_{\partial}}. \quad (\text{III.4.3})$$

Most már látszik, hogy a Peierls érvelés a jelen esetben miben különbözik a szokásostól: ferromágneses modellnél a nagyvonalú

$$P(\Gamma) \leq z^{k_\Gamma}$$

becslés is célravezető, mert $k_\Gamma = |\Gamma|$. Esetünkben $k_\Gamma/|\Gamma|$ tetszőlegesen kicsi lehet, és ennek ellensúlyozására meg kell mutatni, hogy a nevező kellően nagy. A (III.4.3) becslés minden kontúrra igaz. Ha $k_\Gamma > 0$, akkor $k_\Gamma \equiv 2$; (III.4.3) nevezőjéből csak a nulla energiájú ∂ -kat megtartva azt kapjuk, hogy

$$A_x(\varepsilon, <) \leq e^{-4\beta} \sum_{\substack{\Gamma: x \in \text{Int } \Gamma \\ 0 < k_\Gamma < \varepsilon |\Gamma|}} v_\Gamma^{-1}, \quad (\text{III.4.4})$$

rácspontot kapunk: x_1, x_2, \dots, x_{l-1} (az ábrán be vannak karikázva). A (III.4.6) becsléshez ki kell számolnunk n_{l-1} -et, amely az $\{s(x_2), \dots, s(x_{l-1})\}$ spinrendszer alapállapotainak száma azon feltétel mellett, hogy $s(x) = s^c(x)$, ha $x \neq x_i, i=1, \dots, l-1$. v_r ugyanis éppen a Γ nulla-energiájú szakaszain realizálható alapállapotok számainak szorzata. Egy kettő hosszúságú 0-energiájú szakaszhoz az egyetlen s^0 alapállapot rendelhető. Ezért vehető $n_0=1$. Világos, hogy $\{s^0(x_1), \dots, s^0(x_{l-1})\}$ alapállapot, és általában az alapállapotok azok és csak azok a konfigurációk, amelyek nem tartalmaznak $\{\dots, -s^0(x_i), -s^0(x_{i+1}), \dots\}$ részletet. Könnyen látható, hogy n_l kielégíti a Fibonacci számokra felírt differencia-egyenletet,

$$n_{l+1} = n_l + n_{l-1} \quad (\text{III.4.9a})$$

az

$$n_0 = 1, \quad n_1 = 2 \quad (\text{III.4.9b})$$

kezdeti feltétellel. A generátorfüggvények módszerével megoldva ezt az egyenletet, az eredmény

$$\begin{aligned} n_l &= \frac{2\sqrt{5}+4}{5+\sqrt{5}} \left(\frac{\sqrt{5}+1}{2} \right)^l - (-1)^l \frac{2\sqrt{5}-4}{5-\sqrt{5}} \left(\frac{\sqrt{5}-1}{2} \right)^l \\ &\cong \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2} \right)^l \end{aligned} \quad (\text{III.4.10})$$

bármely $l \geq 0$ -ra. Ezért

$$\begin{aligned} v_r &= \prod_{k=1}^{r_r} n_{|\gamma_k|/2-1} \cong \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2} \right)^{\sum_{k=1}^{r_r} \left(\frac{|\gamma_k|}{2} - 1 \right)} \\ &= \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2} \right)^{|\Gamma \cap \Omega_0| - r_r} > \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2} \right)^{(1-3\varepsilon)|\Gamma|/2} = f(|\Gamma|) \end{aligned}$$

ahol (III.4.7)-et és (III.4.8)-at használtuk.

A (III.4.6) becslés segítségével (III.4.4) így folytatható:

$$A_x(\varepsilon, <) < e^{-4\beta} \sum_l |\zeta_l| f(l). \quad (\text{III.4.11})$$

Itt ζ_l egy kontúrhalmoz,

$$\zeta_l = \{\Gamma: x \in \text{Int } \Gamma, 0 < k_r < \varepsilon l, |\Gamma| = l\}.$$

Következő feladatunk felső korlátot adni $|\zeta_l|$ -re. Ehhez ζ_l -t részhalmazokra bontjuk, és ezek elemszámát külön becsüljük. Legyen $b = \langle xy \rangle$ egy adott kötés. A

$$\zeta_l(b, l_0, r) = \{\Gamma \in \zeta_l: b \in \Gamma, |\Gamma \cap \Omega_0| = l_0, r_r = r\}$$

halmoz kontúrjait könnyű megszámlálni. Kiindulva a b kötésből, a kontúr l számú kötése sorbarendeázhető úgy, hogy a szomszédos kötések a duális rács egy pontjában csatlakoznak. Tehát a b -ből kiinduló l hosszúságú önmetsző sétákkal minden kontúr generálható. Egy pozitív energiájú szakasz tetszőleges pontjában a séta legfőlőbb

három különböző irányban folytatható. Egy tetszőleges hosszúságú nulla energiájú szakasz generálása során mindent összevetve hat különböző választás lehetséges, mielőtt a következő pozitív energiájú szakasznál folytathatjuk a sétát: a szakasz első, Ω_0 -on kívüleső élét kétféleképpen, az utolsó ilyen élt legföljebb három különböző módon választhatjuk (itt úgy tekintjük, hogy a ZES mindig egy Ω_0 -hoz tartozó éllel kezdődik; ezért az első, Ω_0 -on kívüli él a duális rácson vagy fölfelé vagy lefelé halad (lásd a (III.4.6) utáni ábrát). A tisztán pozitív energiájú szakaszok összhossza $l - 2l_0$, ezért

$$|\zeta_l(b, l_0, r)| \leq 4^{l-2l_0} 6^r < 4^{l-(1-\varepsilon)l} 6^{\varepsilon l} = 24^{\varepsilon l}, \quad (\text{III.4.12})$$

a (III.4.7) becsléseket is figyelembe véve. Ugyanezekből következik, hogy r választására legföljebb $\varepsilon l, l_0$ -éra legföljebb $\varepsilon l/2$ lehetőség van. Továbbá, a kezdő b kötés kiválasztható egy legföljebb $l/2$ kötést tartalmazó készletből (x -ből $l/2$ lépést téve jobbra, a ζ_l minden kontúrját legalább egy élben metsszük). Mindezt összevetve,

$$\begin{aligned} |\zeta_l| &\leq \frac{1}{4} l^3 \varepsilon^2 24^{\varepsilon l}, \quad \text{ha } l > 2/\varepsilon \\ |\zeta_l| &= 0, \quad \text{ha } l \leq 2/\varepsilon. \end{aligned} \quad (\text{III.4.13})$$

Utóbbi a $k_r < \varepsilon l$ feltételből adódik, és abból, hogy $k_r > 0$ esetén $k_r \geq 2$. (III.4.6)-ot és (III.4.13)-at behelyettesítve (III.4.11)-be azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} A_x(\varepsilon, <) &< \frac{1}{4} e^{-4\beta \varepsilon^2} \sum_{l > 2/\varepsilon} l^3 \{(24 \cdot c^3)/c\}^l \\ c &= \left(\frac{1 + \sqrt{5}}{2} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (\text{III.4.14a})$$

vagy számszerűen,

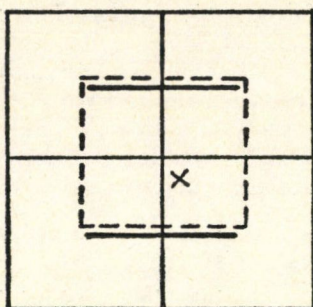
$$A_x(\varepsilon, <) < \frac{1}{4} e^{-4\beta \varepsilon^2} \sum_{l > 2/\varepsilon} (50^{\varepsilon} \times 0.787)^l. \quad (\text{III.4.14b})$$

Tekintsünk most egy olyan x pontot, amely nem közös pontja négy frusztrált négyzetnek. Akkor nincs 0 energiájú kontúr az x pont körül, azaz $A_x(0) = 0$, és

$$\begin{aligned} P(s(x) = -s^0(x)) &\leq A_x(\varepsilon, >) + A_x(\varepsilon, <) \leq \\ &\leq \sum_{l \geq 4} (l/2) 4^l e^{-2\beta \varepsilon l} + (1/4) e^{-4\beta \varepsilon^2} \sum_{l > 2/\varepsilon} (50^{\varepsilon} \times 0.787)^l. \end{aligned} \quad (\text{III.4.15})$$

Ha $\varepsilon = 0.05$ és $\beta > 3.2$, akkor mindkét összeg konvergens. Az 1. Borel—Cantelli lemmából [8] következik, hogy 1 valószínűséggel csak véges sok kontúr veszi körül az x pontot: ez ugyanazt jelenti, mint a tétel (i) pontjaként kimondott perkolációs tulajdonság. Ha ε változatlan értéke mellett β nő, akkor (III.4.15) jobb oldala $1/2$ alá csökken és tart 0-hoz: ez bizonyítja (ii) állítást.

A harmadik állítás bizonyításához az x pontot úgy választjuk, hogy x négy frusztrált négyzet közös pontja. Ekkor is érvényes az $A_x(\varepsilon, >)$ és $A_x(\varepsilon, <)$ -re adott becslés, de $A_x(0) > 0$. Az x pont körül egyetlen 0-energiájú kontúr lehetséges, az, amelynek



négy élet x és az első szomszédjai alkotják. Jelöljük ezt γ -val. Akkor

$$A_x(0) = P(\gamma). \quad (\text{III.4.16})$$

$P(\gamma)$ -ra $\beta < \infty$ esetén nem tudunk kellően jó becslést adni. Nulla hőmérsékleten a termodinamikai limeszben azonban $P(\gamma)$ könnyen kiszámolható. Ha $\beta = \infty$, akkor

$$z^{k_\partial} = 0 \quad \text{ha} \quad k_\partial > 0$$

$$1 \quad \text{ha} \quad k_\partial = 0.$$

Ezt (III.4.2)-be beírva,

$$P(\gamma) = \sum_{\substack{\partial: \gamma \subset \partial \\ k_\partial = 0}} 1 / \sum_{\partial: k_\partial = 0} 1. \quad (\text{III.4.17})$$

Itt a számláló azoknak az alapállapotoknak a száma, amelyek a V -n kívül egybeesnek s^0 -lal, az x pontban pedig $-s^0$ -lal. A nevező az összes, s^0 -lal a V -n kívül egybeeső alapállapotok száma. Minden itt előforduló s alapállapotban $s(y) = s^0(y)$, ha y az x ponttal szomszédos két oszlop valamelyikében van ($y_1 = x_1 \pm 1$). Ezért (III.4.17)-ben elég olyan ∂ -kra szorítkozni, amelyek x oszlopának pontjait veszik körül. Ha ebben az oszlopban V -n belül m_1 pont van x fölött és m_2 alatta, akkor

$$P(\gamma) = \frac{n_{m_1-1} n_{m_2-1}}{n_{m_1+m_2+1}}, \quad (\text{III.4.18})$$

ahol n_l az l -edik Fibonacci szám, (III.4.10). Ha m_1 és m_2 tart végtelenhez, akkor

$$P(\gamma) \rightarrow \frac{2}{5 + \sqrt{5}}.$$

Mivel $\beta \rightarrow \infty$ esetén $A_x(\varepsilon, >)$ és $A_x(\varepsilon, <)$ tart 0-hoz, azért

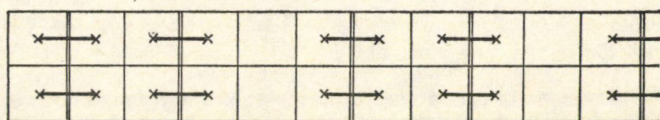
$$P(s(x) = -s^0(x)) = \frac{2}{5 + \sqrt{5}}$$

és ebből következik a tétel utolsó állítása.

5. A Peierls érvelés kiterjesztése egyéb rétegesen frusztrált modellekre?

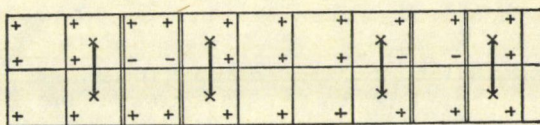
A rétegesen frusztrált modellekben a frusztrált négyzetek teljes oszlopokat foglalnak el. Periodikus φ halmaz esetére vonatkozik Hoever és társai (II/11 hivatkozás) eredménye: legyenek a vízszintes kötések mind ferromágnesesek ($J_{xy}=1$, ha $y_1=x_1\pm 1$), a függőleges kötések oszloponként azonos előjelűek (J_{xy} csak $x_1=y_1$ -től függ) és a v periódushosszal periodikusak ($J_{xy}=J_{x'y'}$, ha $x'_1=y'_1=x_1+v$). Ha v_+ és v_- a perióduson belüli pozitív és negatív kötés-oszlopok száma, akkor $v_+\neq v_-$ szükséges és elégséges feltétel ahhoz, hogy a szabadenergiában egy $\ln|T-T_C|$ típusú szingularitás legyen valamely $T_C>0$ -n. A szerzők automatikusan feltételezték, hogy $T_C>0$ esetén a ferromágneses Ising modellhez hasonló rendeződés megy végbe modelljeikben.

Ez a feltevés nem teljesülhet minden esetben; erre szeretnék itt egy egyszerű érvert adni. Valójában, a Peierls érvelést a Longa—Oleś modelleken túl nem sikerült kiterjeszteni. Ez utóbbiakra $v\geq 3$ és $v_-=1$, tehát $v_+=v-v_-\neq v_-$ mindig teljesül. Igen hasonlóak e modellekhez azok, amelyekben > 2 páros számú frusztrált négyzet-oszlop található egymás mellett. Az ilyen modellekben mindig van két legmagasabb szimmetriájú alapállapot: $\pm s^0$, ahol $s^0\equiv 1$. Az s^0 határában, Ω_0 -ban az összes negatív kötések, és csak ezek szerepelnek:



(Kétszeresen kihúzottak a negatív kötések.)

E modellekben feltehetően vannak az s^0 -hoz és $-s^0$ -hoz tartozó rendezett fázisok $T<T_C$ -re, és a Peierls-érvelés kiterjesztése csak technikai probléma. Ha azonban az egymás melletti frusztrált négyzet-oszlopok száma páratlan, akkor nem tudunk pontosan két kitüntetett alapállapotot találni. Tekintsük például a következő modellt:



A perióduson belül $v_+=3$, $v_-=2$. Ha egy s^0 alapállapothoz (lásd pl. az ábrát) tartozik (a 3. Tétel állítása értelmében) alacsony hőmérsékleti fázis, akkor $-s^0$ -on kívül azon s^1 és $-s^1$ alapállapotokhoz is van fázis, melyek Ω_1 határa az Ω_0 határ eltolja függőleges irányban. Mivel minden alapállapot határában van függőleges él, ez az eltolás (a Hamilton-függvény szimmetria-transzformációja) a $\pm s^0$ -tól különböző $\pm s^1$ -et generál. Konklúziónk tehát ez: ha az egymás melletti frusztrált négyzet-oszlopok száma páratlan, akkor vagy egyetlen fázis van alacsony hőmérsékleten, vagy legalább négy. Egyetlen fázis létezését sugallja egy Y . Uenoval közös közelítő számítás, melyet párkorrelációkra végeztünk el, az alacsony hőmérsékleti sorfejtés módszerével. A kvalitatív következtetés az, hogy vízszintes irányban nem alakulhat ki hosszú távú rend, és a rendszer olyan, mintha egymástól független véges szélességű sávokból állna. Minthogy ez az eredmény nem egzakt, és semmi esetre sem bizonyító erejű, a részletezésétől eltekintek.

IV. A SZABADENERGIA ÉS A KORRELÁCIÓS FÜGGVÉNYEK ANALITIKUS TULAJDONSÁGAI ISING FRUSZTRÁCIÓS MODELLEKBEN

A „fázisátmenet” kifejezést két különböző értelemben szokás használni. Az egyik szóhasználat szerint fázisátmenet van olyankor, ha a rendszernek alacsony hőmérsékleten különböző egyensúlyi állapotai léteznek. Mivel magas hőmérsékleten igen általános feltételek mellett (v. ö. *Dobrushin* unicitási tétele [1]) egyetlen fázis van, következik, hogy létezik egy kritikus hőmérséklet, T_c , amely az egy- és többfázisú hőmérséklet-tartományt elválasztja. Ez a hőmérséklet a termodinamikai függvények szingularitási pontja (bár tudomásom szerint ez nincs általában bizonyítva). A másik értelmezésben éppen a szabadenergia hőmérséklet, külső tér stb. függvényében jelentkező szingularitásai definiálják a fázisátmenetet. Ellenpéldák bizonyítják (Ising modellre *Wegner* [II/29], *Gruber* [2]; kétdimenziós rotátor (XY)-modell [II/51]), hogy a szingularitásból nem következik több fázis létezése. A két típusú vizsgálat egymást kiegészíti. A Peierls érvelésnek ilyen értelemben az Onsager féle számolás [3] a párja, amelyből kiadódott a kétdimenziós ferromágneses Ising modell szabad-energiája. A szabadenergia azonban ritkán számolható ki egzaktul — például az Ising modellé külső mágneses térben már nem —, ezért nagy jelentősége van az általános módszereknek az analitikusság vizsgálatában. Az egyik első és talán a legszebb eredmény ebben az irányban *Lee* és *Yang* nevéhez fűződik [4]. Ők a ferromágneses párkölcsönhatású Ising modell ($J_{xy} > 0$)

$$H = - \sum J_{xy} (s(x) s(y) - 1) - h \sum s(x)$$

állapotösszegét a

$$z = e^{-2\beta h}$$

„aktivitás” polinomjaként vizsgálták, és bebizonyították, hogy ennek a polinomnak a gyökei a komplex sík egységkörén fekszenek. Innen következett, hogy h nem-nulla értékeire a szabadenergia a mágneses tér analitikus függvénye, majd *Lebowitz* és *Penrose* [5] nyomán a hőmérséklet szerinti analitikusság is. A Lee—Yang tétel nagy erénye, túl a szépségén, hogy dimenziótól független, és kiterjeszthető nagyobb spinű klasszikus és kvantum-modellekre [6]. Leghatékonyabb általánosítását éppen a kvantum-Heisenberg modellre való kiterjesztés során érte el *Asano* [7]. *Asano* eljárását *Ruelle* [8] fejlesztette módszerré, érdekes módon ismét egy többváltozós polinomokra vonatkozó tétel segítségével. Az „*Asano* kontrakció” módszerét azután *Ruelle* [9], *Sarbach* és *Rys* [10], *Gruber* és *társai* [11] és sokan mások alkalmazták a szabadenergia analitikussági tartományának becslésére a komplex β és h síkon. Eredmények adódtak nem-ferromágneses modellekre, amelyekben a gyöktartomány nem kör.

Ebben a fejezetben Ising frusztrációs modellek szabadenergiájának és korrelációinak analitikus tulajdonságait vizsgáljuk a komplex β változó függvényében. Alkalmazható lenne az *Asano* kontrakció is, azonban éles eredményekre csak úgy számíthatunk, ha a frusztráció sajátos vonásaihoz idomuló módszert használunk. A magas hőmérsékleti analitikussági tartomány minél jobb becslésére törekszünk, az *Asano* kontrakció viszont az alacsony hőmérsékleti és a külső térbeli analitikusság vizsgálatára a leghatékonyabb. Ezért kidolgozunk egy eljárást a véges térfogathoz tartozó állapotösszeg és korrelációk analitikus kiterjesztéseinek becslésére, amely a legélesebb eredményeket éppen a kívánt esetben (frusztráció, magas hőmérsékleti tartomány) adja. Az eljárás alapja ismét egy többváltozós polinomokra vonatkozó

állítás. Ezt egyszerű formájában az 1. pont, végső alakjában a 3. pont tartalmazza, míg a 2. és 4. pont az alkalmazásokat készíti elő.

Minthogy az alkalmazások során egy meglepő eredmény is adódik, hadd említsük meg, hogy mik a várakozások a szabadenergiával és a korrelációkkal kapcsolatban. Igen általános feltételek mellett ezek analitikus függvényei a hőmérsékletnek, kellően magas hőmérsékleteken. A korrelációk ugyanakkor exponenciálisan csengenek le, amin azt kell érteni, hogy ha A a rácspontok egy halmaza és $d(A) = \min \{|x - y| : x, y \in A, x \neq y\}$, akkor

$$\langle \prod_{x \in A} s(x) \rangle \cong e^{-d(A)/\xi}. \quad (\text{IV.0.1})$$

Itt ξ nem függ A -tól, de függ a hőmérséklettől. A fázisátmenet szokásosan úgy jelentkezik, hogy a magas hőmérsékleti tartományból lehűtve a rendszert, van egy T_c hőmérséklet, amelyhez tartva a $\xi = \xi(T)$ korrelációs hossz divergál. Ha T_c pozitív, akkor többnyire létezik a szabadenergia és korrelációk alacsony hőmérsékleti analitikussági tartománya, és az ún. csonkított korrelációkra fennáll

$$|\langle \prod_{x \in A} s(x) \rangle_{tr}| \cong e^{-d(A)/\xi},$$

ha $T < T_c$. Az eddig ismert modellekben, ha T_c nem pozitív, akkor $T_c = 0$, tehát $\xi(T)$ divergál, ahogy T nullára csökken. Ettől találunk eltérést az alábbi ismertetendő eredményekben.

Módszerünket három modelleszaládra alkalmazzuk. Az elsőbe a Kagomé rácson definiált olyan frusztrált modellek tartoznak, amelyekben minden háromszög plakett frusztrált. A tárgyalt modellek a frusztráció szempontjából az antiferromágneses és a teljesen frusztrált modellek közé esnek. A következő eredményt kapjuk:

1. Tétel

A Kagomé rács fent meghatározott frusztrált modelljeiben a szabadenergia és a korrelációk analitikusak minden pozitív hőmérsékleten és analitikusan kiterjeszthetők $T=0$ -ra. Az exponenciális klaszterképzés (IV.0.1) minden $T \geq 0$ -ra fennáll.

Mondható tehát, hogy e modellek kritikus hőmérséklete negatív. A bizonyítást az 5. pontban ismertetjük.

A másik modelleszalád a négyzetrács olyan frusztrált modelljeiből áll, amelyek frusztráció szempontjából a sakktábla-modell és a teljesen frusztrált modell közé esnek. Itt kevesebbet tudunk bizonyítani:

2. Tétel

A négyzetrács fent meghatározott frusztrált modelljeiben a szabadenergia analitikus minden pozitív hőmérsékleten.

Ezt a tételt a 6. pontban bizonyítjuk.

A harmadik modelleszalád az első kiterjesztése, és azt illusztrálja, hogy az elsőben tapasztalt igen erős frusztráció („szuperfrusztráció”) tetszőleges dimenzióban előfordulhat. A 0 hőmérsékleti exponenciális klaszterképzés azt mutatja, hogy frusztráció esetén az univerzalitás fogalma (a kritikus viselkedés rács típustól való függetlensége) nem — vagy csak leszűkítve — értelmezhető. A „szuperfrusztrált” modelleket a fejezet utolsó, 7. pontjában tárgyaljuk.

1. Az alaplemma

Előre bocsátjuk itt a többváltozós polinomokra vonatkozó állítás legegyszerűbb alakját, általános, de könnyen áttekinthető formában.

Alább (lásd (IV.1.3)) definiálunk egy K komplex változós

$$R(z) = R(z_1, z_2, \dots, z_K)$$

polinomot. Legyen

$$Q = \{1, 2, \dots, K\}$$

és jelölje $[Q]$ a Q részhalmazainak halmazát. $[Q]$ -nak két tulajdonságát használjuk ki:

- (i) $[Q]$ részben rendezett a tartalmazásra nézve. Ha a_1 és a_2 Q részei, akkor a_1 *ki-sebb* a_2 -nél, ha $a_1 \subset a_2$. Ha $A \subset [Q]$, akkor A -nak vannak *minimális elemei*; jelölje $\inf A$ az $A - \{\emptyset\}$ minimális elemei összességét.

Példa: 1) $A = \{\{1\}, \{1, 2\}, \{\emptyset\}, \{2, 3\}, \{1, 2, 3\}\}$, $\inf A = \{\{1\}, \{2, 3\}\}$

2) A kontúrok (ahogy III.1-ben definiáltuk őket) a $Q_0 - \{\emptyset\}$ minimális elemei.

- (ii) $[Q]$ csoport a szimmetrikus differenciával, mint csoportművelettel. A nullaelem az üres halmaz, $\{\emptyset\}$.

Legyen G a $[Q]$ egy alcsoportja. Akkor $\inf G$ generálja G -t: tetszőleges $g \in G$ -hez van $g_1, \dots, g_k \in \inf G$, hogy $g = g_1 \circ g_2 \circ \dots \circ g_k$. Nyilvánvaló, hogy tetszőleges $g \in G$ generálható az $\inf G$ páronként diszjunkt elemeivel is: ha $g_1 \in \inf G$ és $g_1 \subset g$, akkor $g_1 \circ g = g - g_1 \in G$ és $g_1 \cap (g - g_1) = \emptyset$. Legyen $g_2 \in \inf G$, $g_2 \subset g - g_1$ stb. Tehát

$$g = g_1 \cup g_2 \cup \dots \cup g_k$$

$$g_i \in \inf G \quad \text{és} \quad g_i \cap g_j = \emptyset. \quad (\text{IV.1.1})$$

Azt mondjuk, hogy G -t *egyértelműen generálja* $\inf G$, ha a (IV. 1. 1) felbontás egyértelmű G minden elemére.

Példa: 3) $G = \{\{\emptyset\}, \{1, 2\}, \{2, 3\}, \{1, 3\}\}$

$$\inf G = \{\{1, 2\}, \{2, 3\}, \{1, 3\}\}$$

G -t az $\inf G$ egyértelműen generálja.

- 4) Legyen Q a hatszögrács (méhsejtrács) éleinek halmaza, G a rácsra rajzolt párosrendű gráfok csoportja (izomorf a háromszögrács Q_0 halmazával, v. ö. III.1). $\inf G$ elemei a zárt összefüggő gráfok (ezek mind minimálisak); $\inf G$ -vel izomorf a háromszögrácson a kontúrok halmaza (a kontúr III.1 és III.4-beli definíciója a háromszögrácson egybeesik). G -t az $\inf G$ egyértelműen generálja.

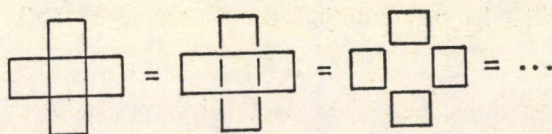
- 5) $G = \{\{\emptyset\}, \{1, 2\}, \{1, 3\}, \{1, 4\}, \{2, 3\}, \{2, 4\}, \{3, 4\}, \{1, 2, 3, 4\}\}$

$$\inf G = \{\{1, 2\}, \{1, 3\}, \{1, 4\}, \{2, 3\}, \{2, 4\}, \{3, 4\}\}.$$

$$\{1, 2, 3, 4\} = \{1, 2\} \cup \{3, 4\} = \{1, 4\} \cup \{2, 3\}$$

Azaz $\inf G$ nem egyértelműen generálja G -t.

- 6) Legyen Q a négyzettrács éleinek halmaza, G a páros rendű zárt gráfok csoportja. $\inf G$ az egyszerű zárt gráfok halmaza, nem generálja egyértelműen G -t:



A négyzetrács önduális, ezért G izomorf Q_0 -lal, inf G a kontúrok halmazával (v. ö. III.1).

Ha $i \in Q$, akkor legyen

$$N_n(i) = |\{g \in \text{inf } G: i \in g \text{ és } |g| = n\}| \quad (\text{IV.1.2})$$

és N_n az $N_n(i)$ -k egy felső korlátja, $N_n \geq N_n(i)$, $i \in Q$.

1. Lemma

Legyen G a $[Q]$ olyan alcsoportja, amelyet inf G egyértelműen generál. Tekintsük az

$$R(z) = \sum_{g \in G} \prod_{i \in g} z_i \equiv \sum_{g \in G} z^g \quad (\text{IV.1.3})$$

polinomot. Tegyük fel, hogy

$$\sum_{n \geq 0} N_n x^n / (1 - \varepsilon)^{n-1} \leq \varepsilon \quad (\text{IV.1.4})$$

teljesül valamilyen $x > 0$ és $\varepsilon < 1$ -re. Akkor

$$(1 - \varepsilon)^K \leq |R(z)| \leq (1 + \varepsilon)^K \quad (\text{IV.1.5})$$

a

$$\{z \in \mathbb{C}^K: |z_i| \leq x, i = 1, 2, \dots, K\}$$

tartományon. (\mathbb{C} a komplex számok halmaza.)

Bizonyítás

Tetszőleges $\alpha \subset Q$ -ra és $i \in Q$ -ra legyen

$$G_\alpha = \{g \in G: g \subset \alpha\} \quad (\text{IV.1.6a})$$

$$R_\alpha = \sum_{g \in G_\alpha} z^g \quad (\text{IV.1.6b})$$

$$r_\alpha^i = \sum_{i \in g \in G_\alpha \cup \{i\}} z^g / R_\alpha \quad (\text{IV.1.6c})$$

$$[i] = \{1, 2, \dots, i\}. \quad (\text{IV.1.6d})$$

R -et egy K -tényezős szorzat alakjában írhatjuk fel a következő módon:

$$\begin{aligned} R &= R_{[K-1]}(1 + r_{[K-1]}^K) = R_{[K-2]}(1 + r_{[K-2]}^{K-1})(1 + r_{[K-1]}^K) = \\ &= \dots = \prod_{i=1}^K (1 + r_{[i-1]}^i). \end{aligned} \quad (\text{IV.1.7})$$

Az állítást bizonyítja, ha megmutatjuk, hogy tetszőleges $i \in Q$ és $\alpha \subset Q$ esetén

$$|r_{\alpha}^i| \leq \varepsilon \quad (\text{IV.1.8})$$

feltéve, hogy $|z_j| \leq x$ minden $j \in Q$ -ra. A (IV.1.8) egyenlőtlenséget az $|\alpha|$ szerinti indukcióval igazoljuk.

$$r_{\alpha}^i = z_i \quad \text{ha} \quad \{i\} \in G$$

$$= 0 \quad \text{különb.}$$

Ezért

$$|r_{\alpha}^i| \leq x = N_1 x \leq \sum_n N_n x^n / (1 - \varepsilon)^{n-1} \leq \varepsilon.$$

Tegyük fel, hogy

$$|r_{\alpha}^j| \leq \varepsilon, \quad \text{ha} \quad j \in Q \quad \text{és} \quad |\alpha| < i.$$

Elég megmutatni, hogy

$$|r_{[i]}^{i+1}| \leq \varepsilon;$$

egyéb $\alpha \subset Q$, $j \in Q$ -ra ($|\alpha| = i$) az eredmény Q permutációjával adódik. A (IV.1.6c) definícióból

$$r_{[i]}^{i+1} = \sum_{i+1 \in g \in G_{[i+1]}} z^g / R_{[i]} = \sum_{i+1 \in g \in \inf G_{[i+1]}} z^g R_{[i]-g} / R_{[i]}. \quad (\text{IV.1.9})$$

Itt a második egyenlőséghez felhasználtuk, hogy G tetszőleges eleme egyértelműen áll elő $\inf G$ -beli elemek diszjunkt uniójaként. Az összegezésben szereplő g halmazok

$$g = \{i+1, j_2, j_3, \dots, j_n\} \subset [i+1]$$

alakúak. Legyen

$$g'k = \{j_2, j_3, \dots, j_k\},$$

akkor írható, a (IV.1.7) faktorizálást $R_{[i]}$ -re alkalmazva, hogy

$$R_{[i]} = R_{[i]-g} \prod_{k=2}^{|g|} (1 + r_{[i]-g'k}^{j_k})$$

(itt $|g| = n$). Ezt (IV.1.9)-be behelyettesítve

$$r_{[i]}^{i+1} = \sum_{i+1 \in g \in \inf G_{[i+1]}} z^g / \prod_{k=2}^{|g|} (1 + r_{[i]-g'k}^{j_k}). \quad (\text{IV.1.10})$$

Az indukciós feltevés miatt

$$|r_{[i]-g'k}^{j_k}| \leq \varepsilon,$$

ezért

$$|r_{[i]}^{i+1}| \leq \sum_{i+1 \in g \in \inf G_{[i+1]}} x^{|g|} / (1 - \varepsilon)^{|g|-1} \leq \sum_{n \geq 0} N_n x^n / (1 - \varepsilon)^{n-1} \leq \varepsilon.$$

Ezzel a lemmát bizonyítottuk.

2. Magas hőmérsékleti tartomány Ising modellekben, méhsejt rácson

Az előbbi lemma közvetlen alkalmazásaként megbecsüljük első-szomszéd kölcsönhatású Ising modellek magas hőmérsékleti analitikussági tartományát. Az eredmény egy igen gyenge felső becslés a lehetséges kritikus hőmérsékletre:

$$K_c > \frac{1}{2} \ln \frac{5}{3} \approx 0.2554$$

(a ferromágneses első-szomszéd modellre $K_c = 0.6585^{[12]}$; $K_c = \beta_c \times$ kölcsönhatás), azonban itt nem is az éles eredmény a célunk, hanem egy egyszerű példa bemutatása.

Ising modellek Hamilton-függvénye mindig megadható a következő alakban:

$$H_B = - \sum_{b \in B} J_b \prod_{x \in b} s(x) \equiv \sum_{b \in B} J_b s^b. \quad (\text{IV.2.1})$$

Itt $s(x) = \pm 1$ az x rácsponthoz tartozó Ising-spin, B elemei a rács bizonyos véges ponthalmazai (a „kötések”), és J_b a b kötéshez tartozó kölcsönhatás. Az érintett rácspontok a

$$A = \bigcup_{b \in B} b \quad (\text{IV.2.2})$$

halmaz pontjai, és a megfelelő állapotösszeg

$$Z_B = \sum_{\substack{s(x) = \pm 1 \\ x \in A}} \exp \{ -\beta H_B(s) \}. \quad (\text{IV.2.3})$$

Az

$$e^{\beta J_b s^b} = \text{ch } \beta J_b + s^b \text{ sh } \beta J_b$$

azonosság alapján, (IV.2.3)-ból a jól ismert módon [II/7] kapható egy magas hőmérsékleti sor,

$$Z_B = 2^{|A|} \left(\prod_{b \in B} \text{ch } \beta J_b \right) R_B \quad (\text{IV.2.4})$$

ahol

$$R_B = \sum_{g \in G_B} \prod_{b \in g} \text{th } \beta J_b. \quad (\text{IV.2.5})$$

Az összegezés itt a G_B „magas hőmérsékleti csoporton” fut: ez olyan $\{b_1, \dots, b_k\} \subset B$ kötéshalmazokból áll, hogy

$$\bigcup_{i=1}^k b_i$$

minden pontja a b_i -k közül páros sokban van benne. (Ekvivalens állítás, hogy b_1, \dots, b_k szimmetrikus differenciája üres,

$$b_1 \circ b_2 \circ \dots \circ b_k = \emptyset.)$$

G_B -ben a csoportművelet a *kötéshalmazok* szimmetrikus differenciája (szemben a ponthalmazokéval, mint az előző zárójelben). Az R_B összeg a

$$\text{th } \beta J_b \rightarrow z_b \quad (\text{IV.2.6})$$

helyettesítéssel a z_b változók polinomja, és szerkezete olyan, mint (IV.1.3) polinomjának.

Tekintsük most a méhsejtrácsot, és legyen B az első-szomszéd párok halmaza. A 4. példa szerint a magashőmérsékleti csoportot egyértelműen generálják a minimális elemei, ezért az állapotösszegre vonatkozik az 1. Lemma becslése. A (IV.1.2)-vel definiált $N_n(\langle xy \rangle)$ nem más, mint az $\langle xy \rangle$ kötést tartalmazó n hosszúságú zárt gráfok száma. Egy felső becslés erre

$$\begin{aligned} N_n &= 0, \quad n < 6 \\ &\leq 2^n, \quad n \geq 6. \end{aligned} \quad (\text{IV.2.7})$$

A (IV.1.4) egyenlőtlenség ezekkel a számokkal a

$$\sum_{n=6}^{\infty} (2x)^n / (1-\varepsilon)^{n-1} = \frac{(2x)^6}{(1-\varepsilon)^5} \frac{1}{1 - \frac{2x}{1-\varepsilon}} \leq \varepsilon \quad (\text{IV.2.8})$$

feltételt szabja ε -ra és x -re. Könnyen ellenőrizhető, hogy

$$\varepsilon = x = 1/4$$

kielégíti a feltételt. A lemma szerint R_B ((IV.2.5) képlet), mint a $z_b \equiv z_{xy}$ változók függvénye, nem lehet nulla, ha $|z_{xy}| \leq 1/4$. Pontosabban,

$$(3/4)^{|B|} \leq |R_B| \leq (5/4)^{|B|} \quad (\text{IV.2.9})$$

ha

$$|z_{xy}| \leq 1/4 \quad (\text{IV.2.10})$$

minden $\langle xy \rangle \in B$ -re. Így

$$3/4 \leq |R_B^{1/|B|}| \leq 5/4 \quad (\text{IV.2.11})$$

a (IV.2.10) tartományon, és ez a becslés független attól, hogy B a hatszögrács hány első-szomszéd párját tartalmazza. Tekintsük most az állapotösszeg $1/|A|$ -adik hatványát (A -t (IV.2.2) adja meg),

$$Z_B^{1/|A|} = 2 \left(\prod_{\langle xy \rangle \in B} \text{ch } \beta J_{xy} \right)^{\frac{1}{|B|} \cdot \frac{|B|}{|A|}} R_B^{\frac{1}{|B|} \cdot \frac{|B|}{|A|}} \quad (\text{IV.2.12})$$

a B kötéshalmazok egy olyan végtelenhez tartó sorozata mellett, amelyre

$$|\partial(A)|/|A| \rightarrow 0. \quad (\text{IV.2.13})$$

($\partial(A)$ a A -n kívüli, A -val szomszédos pontok halmaza, vö. III.1 pont; A ún. van Hove-értelmenben tart végtelenhez [13].) Ekkor

$$|B|/|A| \rightarrow 3/2,$$

továbbá, ha a kölcsönhatás periodikus, akkor

$$\left(\prod_{\langle xy \rangle \in B} \text{ch } \beta J_{xy} \right)^{1/|B|}$$

tart a véges sok különböző $\text{ch } \beta J_{xy}$ érték mértani közepéhez. Definíció szerint

$$Z_B^{1/|A|} = \exp\{-\beta f_A\}, \quad (\text{IV.2.14})$$

ahol f_A a fajlagos szabadenergia. Periodikus kölcsönhatás és van Hove értelmű határátmenet esetén f konvergál valamely f -hez (Ruelle^[13]), ezért létezik $Z_B^{1/|A|}$ limesze. Következik, hogy $R_B^{1/|B|}$ szintén konvergens.

Az $\{R_B^{1/|B|}\}$ sorozat elemeiről, mint a z_{xy} változók függvényeiről tudjuk tehát a következőket: B szerint egyenletesen korlátosak és 0-hoz nem torlódnak a (IV.2.10) tartományon, továbbá e tartomány valós tengellyel való metszetén konvergálnak egy r függvényhez. Innen Vitali tétele szerint (Titchmarsh^[14]) következik, hogy $|z_{xy}| < 1/4$ -re $R_B^{1/|B|}$ egy analitikus függvényhez konvergál. Ez szükségképpen az r függvény analitikus kiterjesztése, tehát a

$$|\operatorname{th} J_{xy}/T| < 1/4 \quad (\text{minden } \langle xy \rangle \in B\text{-re}) \quad (\text{IV.2.15})$$

feltételt kielégítő hőmérséklet-tartományban ($T=1/\beta$) r a hőmérséklet analitikus függvénye. Mivel a limeszfüggvény nem lehet nulla $|z_{xy}| < 1/4$ -re, ezért a logaritmusa is analitikus ugyanitt. De ekkor a fajlagos szabadenergia,

$$f(T) = -\frac{3}{2} T \left\{ \ln r + \lim_B \frac{1}{|B|} \sum_{\langle xy \rangle \in B} \ln \operatorname{ch} J_{xy}/T \right\} - T \ln 2 \quad (\text{IV.2.16})$$

szintén analitikus a (IV.2.15) hőmérsékleten. Ebből következik J_{xy}/T kritikus értékére a pont elején megadott alsó korlát.

A kritikus hőmérsékletre jobb becslést kaphatnánk, ha (IV.2.7) helyett kisebb felső korlátokat vennénk $N_n(\langle xy \rangle)$ -hoz. Például,

$$N_{2n+1} = 0 \quad (\text{IV.2.17})$$

$$N_8 = 0, \quad N_{10} = 10, \quad N_{12} = 8, \quad \text{stb.}$$

n kis értékeire könnyű pontosan kiszámolni $N_n(\langle xy \rangle)$ -t (mint fentebb $n=10, 12$ -re). Ezt a lehetőséget később, más modellek esetében ki fogjuk használni.

3. Az alaplemma egy hasznos általánosítása

Célunk általában az Ising állapotösszegek (IV.2.5) és korrelációk becslése. Látuk azonban (vö. 6. példával), hogy a G_B magas hőmérsékleti csoportot a minimális elemei nem mindig generálják egyértelműen. Az 1. Lemma nem alkalmazható ilyen esetekben. Egy általánosítása azonban mindig használható.

Legyen ismét $Q = \{1, 2, \dots, K\}$, G a $[Q]$ alcsoportja. Ezek mellett most tekinteni fogjuk $[Q]$ -nak G szerinti Γ mellékosztályait, azaz a $[Q]/G$ faktorcsoporthoz tartozó $\Gamma \in [Q]/G$ -hez adott a

$$z = \{z_1, \dots, z_K\} \quad (\text{IV.3.1})$$

változók

$$R^\Gamma(z) = \sum_{g \in \Gamma} \prod_{i \in g} z_i \equiv \sum_{g \in \Gamma} z^g \quad (\text{IV.3.2})$$

polinomja (R^G azonos (IV.1.3)-mal). Ha Q -t egy rács kötéshalmazával, G -t a megfelelő magas hőmérsékleti csoporttal helyettesítjük, akkor

$$R^\Gamma(z)/R^G(z)$$

egy korrelációs függvény analitikus kiterjesztésének felel meg (erre később visszatérünk). Érthető tehát, hogy $R^I(z)$ becslésére törekszünk.

Tekintsük Q egy diszjunkt lefedését,

$$Q = \bigcup_{i=1}^N Q^i, \quad Q^i \cap Q^j = \emptyset \quad (i \neq j) \quad (\text{IV.3.3})$$

és legyen G_{Q^i} a G alcsoportja Q^i -ben:

$$G_{Q^i} = \{g \in G: g \subset Q^i\} \quad (\text{IV.3.4})$$

(ez összhangban van a (IV.1.6a) jelöléssel).

G_{Q^i} alcsoportja $[Q^i]$ -nak is ($[Q^i]$ a Q^i részhalmazainak halmaza), ezért képezhető a $[Q^i]/G_{Q^i}$ faktorcsoporthoz. Ennek elemei G_{Q^i} és a vele képezett mellékosztályok $[Q^i]$ -ben. Ezeket a, b stb. betűvel jelöljük, vagy az a^i, b^i stb. jelölést használjuk, ha hangsúlyozni kívánjuk a Q^i -hez tartozást. Válasszunk most minden i -hez ($i=1, 2, \dots, N$) egyetlen $a^i \in [Q^i]$ mellékosztályt ($a^i = G_{Q^i}$ lehet), és legyen ezek direkt összege

$$\gamma = a^1 \oplus a^2 \oplus \dots \oplus a^N. \quad (\text{IV.3.5})$$

Definíció szerint $\gamma \in [Q]$, és

$$\gamma = \{g \subset Q: g \cap Q^i \in a^i, \quad i = 1, \dots, N\}. \quad (\text{IV.3.6})$$

Ha $a^i = G_{Q^i}$ minden i -re, akkor a direkt összeg a G egy

$$G^0 = \bigoplus_{i=1}^N G_{Q^i} \quad (\text{IV.3.7})$$

alcsoportját szolgáltatja. Látható (IV.3.6)-ból, hogy γ a $[Q]$ -nak egy G^0 szerinti mellékosztálya, tehát $[Q]/G^0$ eleme. (IV.3.5) invertálásával

$$a^i = \gamma \cap Q^i \equiv \{g \cap Q^i: g \in \gamma\} \quad (\text{IV.3.8})$$

tehát a^i a γ -nak Q^i -re való vetülete. Ha

$$\gamma = \bigoplus a^i$$

$$\gamma' = \bigoplus b^i$$

akkor a $[Q]/G^0$ -beli szorzás definíciója szerint

$$\gamma\gamma' = \bigoplus a^i b^i = \bigoplus c^i. \quad (\text{IV.3.9})$$

Itt

$$a^i b^i = c^i = \{g_1 \circ g_2 \subset Q^i: g_1 \in a^i, g_2 \in b^i\} \quad (\text{IV.3.10})$$

maga is $[Q^i]/G_{Q^i}$ egy eleme.

Tetszőleges $\gamma \in [Q]/G^0$ -t reprezentálhatunk az

$$a^i = \gamma \cap Q^i \neq G_{Q^i}$$

vetületeinek halmazával. Továbbá, a

$$\Sigma = \{\{a^i\}_{i \in \alpha}: \alpha \subset \{1, 2, \dots, N\}, a^i \in [Q^i]/G_{Q^i}, a^i \neq G_{Q^i}\} \quad (\text{IV.3.11})$$

halmazt csoporttá tehetjük a következő csoportművelettel: ha

$$\{a^i\}_{i \in \alpha}, \quad \{b^j\}_{j \in \beta} \in \Sigma$$

akkor

$$\{a^i\}_{i \in \alpha} \cdot \{b^j\}_{j \in \beta} \equiv \{a^i\}_{i \in \alpha - \beta} \cup \{b^j\}_{j \in \beta - \alpha} \cup (\{a^i b^j\}_{i \in \alpha \cap \beta} - \{G_{Q^i}\}_{i \in \alpha \cap \beta}) \quad (\text{IV.3.12})$$

Σ , ezzel a csoportművelettel felszerelve, izomorf $[Q]/G^0$ -al. A jelölésben nem fogunk különbséget tenni $\gamma \in [Q]/G^0$ és Σ -beli képe között.

Ha a a $[Q^i]$ -nak egy G_{Q^i} -től különböző mellékosztálya ($i=1, \dots, N$), akkor a -hoz hozzárendelünk egy ζ_a komplex változót. Legyen $A \subset \Sigma$, ehhez definiálható a

$$T^A(\zeta) = \sum_{\gamma \in A} \prod_{a \in \gamma} \zeta_a \equiv \sum_{\gamma \in A} \zeta^\gamma \quad (\text{IV.3.13})$$

polinom. Az ilyen polinomok közül csak azokat fogjuk vizsgálni, amelyek kapcsolatba hozhatók az R^r polinomokkal. Ehhez megjegyezzük a következőket:

Ha $\Gamma \in [Q]/G$, akkor

$$\Gamma = \bigcup_{i=1}^m \gamma_i, \quad \gamma_i \in [Q]/G^0, \quad (\text{IV.3.14})$$

azaz Γ a $[Q]$ -nak teljes, G^0 szerinti mellékosztályaiból áll. Valóban, ha $g_1, g_2 \in [Q]$ és ekvivalensek G^0 szerint (azaz $g_1 \circ g_2 \in G^0$), akkor ekvivalensek G szerint is ($g_1 \circ g_2 \in G$). Bevezetjük a

$$\Gamma/G^0 = \{\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_m\} \quad (\text{IV.3.15})$$

jelölést, ahol $\gamma_1, \dots, \gamma_m$ a Γ -t alkotó G^0 szerinti mellékosztályok. ($\Gamma = G$ -re a G/G^0 faktorcsoportot kapjuk. Fennáll, hogy

$$m \equiv |\Gamma/G^0| = |G/G^0| = |G|/|G^0| \quad (\text{IV.3.16})$$

függetlenül Γ -tól.)

Legyen S^Γ a Σ -nak az a része, amely izomorf Γ/G^0 -al, és

$$R^0(z) = \sum_{g \in G^0} z^g. \quad (\text{IV.3.17})$$

Igaz a következő állítás:

2. Lemma

$$\frac{R^\Gamma(z)}{R^0(z)} = T^{S^\Gamma}(\zeta), \quad (\text{IV.3.18})$$

ha

$$\zeta_{a^i} = \sum_{g \in a^i} z^g / \sum_{g \in G_{Q^i}} z^g. \quad (\text{IV.3.19})$$

Bizonyítás

$R^\Gamma(z)$ -t felírhatjuk a következő alakban:

$$\begin{aligned} R^\Gamma(z) &= \sum_{g_1 \in Q^1} \sum_{g_2 \in Q^2} \dots \sum_{\substack{g_N \in Q^N \\ g_1 \circ g_2 \circ \dots \circ g_N \in \Gamma}} z^{g_1} z^{g_2} \dots z^{g_N} \\ &= \sum_{a^1 \in [Q^1]/G_{Q^1}} \sum_{a^2 \in [Q^2]/G_{Q^2}} \dots \sum_{a^N \in [Q^N]/G_{Q^N}} \sum_{a^1 \oplus \dots \oplus a^N \in \Gamma/G^0} z^{a^1} \dots z^{a^N}. \end{aligned} \quad (\text{IV.3.20})$$

Figyelembe véve, hogy

$$R^0(z) = \prod_{i=1}^N \sum_{g \in G_{Q^i}} z^g, \quad (\text{IV.3.21})$$

$$\frac{R^r(z)}{R^0(z)} = \sum_{a^1 \in [Q^1]/G_{Q^1}} \sum_{a^2 \in [Q^2]/G_{Q^2}} \dots \sum_{a^N \in [Q^N]/G_{Q^N}} \zeta_{a^1} \zeta_{a^2} \dots \zeta_{a^N}, \quad (\text{IV.3.22})$$

$a^1 \oplus \dots \oplus a^N \in \Gamma/G^0$

Itt az a^i -k között szerepelhet G_{Q^i} ; a megfelelő ζ -t úgy definiáljuk, hogy

$$\zeta_{G_{Q^i}} \equiv 1. \quad (\text{IV.3.23})$$

A (IV.3.22) egyenlet ezért így folytatható:

$$\frac{R^r(z)}{R^0(z)} = \sum_{\gamma \in S^r} \prod_{a \in \gamma} \zeta_a \quad (\text{IV.3.24})$$

és ez éppen T^{S^r} , a (IV.3.13) definíció szerint.

Az S halmazok körül S^G kitüntetett szerepet játszik. S^G a G/G^0 -al izomorf csoport, amely osztályozást generált \sum -n, az S^r osztályokkal. Minthogy \sum részben rendezett a tartalmazásra nézve, definiálhatók részhalmazainak minimális elemei. Ha $\Gamma \in [Q]/G$, akkor jelölje

$$\inf S^r$$

az $S^r - \{\emptyset\}$ minimális elemeinek halmazát. Ez a definíció analógja az 1. pontbelinek, de megjegyezzük, hogy $\Gamma \neq G$ esetén $\{\emptyset\} \notin S^r$, ezért elhagyása fölösleges. Tetszőleges $\gamma \in \sum$ eleme valamely S^r -nak és fölbontható egy $\inf S^r$ -beli elem és $\inf S^G$ -beliek diszjunkt uniójára. Ez a felbontás nem mindig egyértelmű, fennáll azonban a következő: *a Q alaphalmaz (IV.3.3.) lefedése mindig megválasztható úgy, hogy minden $\gamma \in \sum$ felbontása egyértelmű legyen.* (Ilyen — nem triviális — lefedés például $Q = Q^1 \cup \dots \cup Q^N$, $Q^1 \cap Q^2 = \emptyset$. (További diszkusszió következik a 4. Lemmában.) A (IV.1.2) definíció analógja ez lesz:

$$N_n(i) = |\{\gamma \in \inf S^G : a^i \in \gamma \text{ valamely } a^i \neq G_{Q^i}\text{-ra} \\ \text{és } |\gamma| = n\}| \quad (\text{IV.3.25})$$

és N_n egy felső korlát az $N_n(i)$ -khez: továbbá, $\Gamma \neq G$ esetén

$$N_n^r = |\{\gamma \in \inf S^r : |\gamma| = n\}|. \quad (\text{IV.3.26})$$

Kimondhatjuk ezután az alaplemma általánosítását.

3. Lemma

Az előbbi definíciók mellett legyen $\{Q^1, \dots, Q^N\}$ a Q olyan lefedése, amely mellett \sum elemeinek felbontása egyértelmű. Tegyük föl, hogy

$$\sum_{n=0}^{\infty} N_n x^n / (1-x)^{n-1} \leq \varepsilon \quad (\text{IV.3.27})$$

kielégíthető valamilyen $x > 0$ és $\varepsilon < 1$ értékekkel. Akkor a

$$\{\zeta : |\zeta_{a^i}| \leq x \text{ minden } a^i \in ([Q^i]/G_{Q^i}) - G_{Q^i}, i = 1, \dots, N\} \quad (\text{IV.3.28})$$

tartományban

$$(1-\varepsilon)^{N-1} \leq |T^{SG}(\zeta)| \leq (1+\varepsilon)^{N-1} \quad (\text{IV.3.29})$$

és

$$|T^{SF}(\zeta)/T^{SG}(\zeta)| \leq \sum_n N_n^T x^n / (1-\varepsilon)^n. \quad (\text{IV.3.30})$$

Bizonyítás

A (IV.3.29) egyenlőtlenség bizonyítása szorosan követi az 1. Lemma bizonyításának menetét.

Legyen $\alpha \subset \{1, \dots, N\} \equiv [N]$, és

$$\hat{Q}^i = ([Q^i]/G_{Q^i}) - G_{Q^i}.$$

A (IV.1.6) egyenletek analógjai

$$S_\alpha^G = \{\gamma \in S^G : \gamma \subset \bigcup_{i \in \alpha} \hat{Q}^i\} \quad (\text{IV.3.31a})$$

$$T_\alpha^{SG} = \sum_{\gamma \in S_\alpha^G} \zeta^\gamma \quad (\text{IV.3.31b})$$

$$t_\alpha^i = \sum_{\substack{\gamma \in S_\alpha^G \cup \{\emptyset\} \\ \text{supp } \gamma \ni i}} \zeta^\gamma / T_\alpha^{SG} \quad (\text{IV.3.31c})$$

$$[i] = \{1, 2, \dots, i\}. \quad (\text{IV.3.31d})$$

Itt

$$\text{supp } \gamma = \{i \in [N] : \gamma \cap \hat{Q}^i \neq \emptyset\} \quad (\text{IV.3.32})$$

E jelölésekkel a

$$T^{SG} = \prod_{i=1}^{N-1} (1 + t_{[i]}^{i+1}) \quad (\text{IV.3.33})$$

és

$$t_{[i]}^{i+1} = \sum_{\substack{\gamma \in \inf S_{[i+1]}^G \\ \text{supp } \gamma \ni i+1}} \zeta^\gamma / \prod_{k=2}^{[i]} (1 + t_{[i]-\gamma'k}^{j_k}) \quad (\text{IV.3.34})$$

egyenleteket kapjuk, (IV.1.7), illetve (IV.1.10) analógjaként. A (IV.3.34) egyenletben j_k a γ tartójának k -adik pontja,

$$\text{supp } \gamma = \{i+1, j_2, \dots, j_n\}$$

és

$$\gamma'k = \{j_2, \dots, j_k\}.$$

Teljes indukcióval belátható, hogy a lemma feltételei mellett

$$|t_\alpha^i(\zeta)| \leq \varepsilon \quad (\text{IV.3.35})$$

és innen következik (IV.3.29).

A (IV.3.30) egyenlőtlenség bizonyításához megjegyezzük, hogy tetszőleges $\gamma \in S^F$ felbontható a

$$\gamma = \gamma_1 \cup \gamma_2$$

alakban, ahol

$$\gamma_1 \cap \gamma_2 = \emptyset$$

$$\gamma_1 \in \inf S^T$$

$$\gamma_2 \in S^G.$$

(γ_2 a $\gamma \inf S^G$ -beli komponenseinek uniója). Ez a felbontás — a lemma feltevése miatt — egyértelmű. Ezért

$$T^{S^T}(\zeta)/T^{S^G}(\zeta) = \sum_{\gamma \in \inf S^T} \zeta^\gamma T_{[N] - \text{supp } \gamma}^{S^G} / T_{[N]}^{S^G}$$

$$(T_{[N]}^{S^G} = T^{S^G}).$$

Egyszerűsítve $T_{[N] - \text{supp } \gamma}^{S^G}$ -val azt kapjuk, hogy

$$T^{S^T}(\zeta)/T^{S^G}(\zeta) = \sum_{\gamma \in \inf S^T} \zeta^\gamma / \prod_{k=1}^{|\gamma|} (1 + t_{[N] - \gamma'k}^j). \quad (\text{IV.3.36})$$

Az állított egyenlőtlenség innen következik, felhasználva (IV.3.35)-öt és N_n^T definícióját.

4. Főpélda a 3. Lemmához: Ising modellek

Ha Q -nak egy $B = \{b_1, \dots, b_k\}$ kötéshalmazt feleltetünk meg és a $G \subset [Q]$ csoportnak a G_B magas hőmérsékleti csoportot, akkor láttuk, hogy az R^G polinom megfelelője az állapotösszeggel arányos R_B (IV.2.5). Mivel $[B]$ az összes kötéshalmazok halmaza, azért $[B]$ egy tetszőleges $\{b_1, \dots, b_k\}$ elemére

$$b_1 \circ b_2 \circ \dots \circ b_k = d$$

a Λ pontthalmaz (lásd IV.2.2) egy nem feltétlenül üres része. Egy Γ ekvivalencia-osztálynak a $[B]$ egy olyan Γ_d részhalmaza felel meg ($d \in \Lambda$), hogy minden $g \in \Gamma_d$ kötéshalmazban a kötések szimmetrikus differenciája

$$\circ \{b \in g\} = d$$

független g -től. R^Γ -nak tehát

$$R_B^d = \sum_{\substack{g \in [B] \\ \circ \{b \in g\} = d}} z^g = \sum_{g \in \Gamma_d} z^g \quad (\text{IV.4.1})$$

a megfelelője. Ha z_b -t βJ_b -vel helyettesítjük, akkor a magas hőmérsékleti sorfejtés szabályai szerint ^[11/7]

$$\frac{R_B^d}{R_B} = \langle \prod_{x \in d} s(x) \rangle_B. \quad (\text{IV.4.2})$$

$R^0(z)$ (IV.3.21) megfelelője

$$R^0 = \prod_{i=1}^N R_{B^i}, \quad (\text{IV.4.3})$$

ha B -t a B^i kötéshalmazok diszjunkt uniójára bontjuk fel. Innen a 2. Lemma (IV.3.18 képlet) segítségével megkapjuk T^{S^T} megfelelőjét, melyet T_B^d -vel jelölünk, ha $\Gamma \leftrightarrow \Gamma_d$.

A 3. Lemma tehát

$$T_B^o \equiv T_B = \frac{R_B}{\prod R_{B^i}} \quad (\text{IV.4.4})$$

-re ad becslést a (IV.3.29) formulával, és

$$\frac{T_B^d}{T_B} = \frac{R_B^d}{R_B} = \langle \prod_{x \in d} s(x) \rangle_B \equiv \langle s^d \rangle_B \quad (\text{IV.4.5})$$

-re a (IV.3.30) egyenlőtlenséggel — feltéve, hogy ζ és z között fennáll a (IV.3.19) reláció, és teljesülnek a lemma feltételei. Most megvizsgáljuk, hogy az adott esetben mit jelentenek (IV.3.19) és a lemma feltételei.

Valamely $\{b_1, \dots, b_k\} \subset B^i$ kötéshalmaz akkor és csak akkor van G_{B^i} -ben (ez a G_Q megfelelője), ha $b_1 \circ \dots \circ b_k = \emptyset$. Egy $a^i \in [B^i]/G_{B^i}$ mellékosztály jellemezhető egy

$$d_i \subset A_i = \bigcup_{b \in B^i} b \quad (\text{IV.4.6})$$

ponthalmazzal: tetszőleges $\{b_1, \dots, b_k\} \in a^i$ -re $b_1 \circ \dots \circ b_k = d_i$. Ha fennáll (IV.3.19), és z_b -t helyettesítjük βJ_b -vel, akkor

$$\zeta_{a^i} = \langle \prod_{x \in d_i} s(x) \rangle_{B^i, \beta}. \quad (\text{IV.4.7})$$

A ζ szerinti sorfejtés tehát azt jelenti, hogy a szabadenergia érdemi részét és a korrelációkat kis alegységeken vett korrelációkkal fejezzük ki. ζ és z egybeesnek, ha az alegységek egyetlen kötést tartalmaznak.

A B kötéshalmaz lefedését úgy kell megválasztani, hogy a megfelelő \sum halmaz elemeinek felbontása egyértelmű legyen. Többféle eljárás lehetséges, a kötések típusától is függően. Alább megadok egy általános szabályt, amely mindig célra vezet.

4. Lemma

Tegyük fel, hogy a (IV.4.6)-tal definiált A_i halmazokra teljesül: a rács tetszőleges pontja e halmazok közül legfőljebb kettőben van benne. Akkor bármely $\gamma \in \sum$ -hoz létezik egyetlen $\{\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n\} \subset \sum$ úgy, hogy

$$\begin{aligned} \gamma &= \gamma_0 \cup \gamma_1 \cup \dots \cup \gamma_n \\ \gamma_k \cap \gamma_l &= \emptyset \end{aligned} \quad (\text{IV.4.8})$$

$$\gamma_k \in \inf S^{G_B} \quad \text{ha} \quad k \equiv 1.$$

Megjegyzés

Ha $\gamma \in S^T$ valamely $\Gamma \in [B]/G_B$ -re, akkor szükségképpen $\gamma_0 \in \inf S^T$.

Bizonyítás

Legyen

$$\begin{aligned} \gamma &= \{a^i\}_{i \in \alpha} \\ \alpha &\subset \{1, 2, \dots, N\} \\ a^i &\in [B^i]/G_{B^i}, \quad a^i \neq G_{B^i}. \end{aligned} \quad (\text{IV.4.9})$$

A (IV.4.6) képlet szerint létezik egyértelműen egy $a^i \rightarrow d_i \subset A_i$ megfeleltetés; γ tehát reprezentálható a $\{d_i\}_{i \in \alpha}$ halmazzal. Tudjuk, hogy létezik γ -nak (IV.4.8) alakú felbontása; csak az unicitást kell bizonyítani. Ha a Γ ekvivalenciaosztály a $d \subset A$ pontalmazzal jellemezhető (azaz $\Gamma = \Gamma_d$, lásd e pont első bekezdését) akkor

$$\circ \{d_i: i \in \alpha\} = d. \quad (\text{IV.4.10})$$

(IV.4.8) és az azt követő megjegyzés szerint

$$\begin{aligned} \circ \{d_i: i \in \text{supp } \gamma_k\} &= \emptyset, \quad k \geq 1 \\ &= d, \quad k = 0. \end{aligned} \quad (\text{IV.4.11})$$

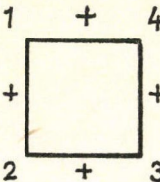
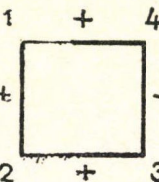
Ezt és a lemma feltételét figyelembe véve, γ -ból kiindulva egyértelműen megkonstruálható a (IV.4.8) felbontás:

Induljunk ki egy tetszőleges $a^i \in \gamma$ -ból. Ha $d_i \cap d \neq \emptyset$, akkor $a_i \in \gamma_0$. Ha emellett $d_i - d \neq \emptyset$, és $x \in d_i - d$, akkor $a^j \in \gamma_0$ azon egyértelműen meghatározott $j \in \alpha$ -ra ($j \neq i$), melyre $x \in A_j$. Most egy $y \in (d_i \cap d_j) - d$ ponthoz megtalálható azon egyetlen $d_k \subset A_k$ ($k \neq i, j$), melyre $y \in d_k$, és ezért $a^k \in \gamma_0$. Az eljárást folytatva γ_0 véges sok lépésben kimeríthető. Ha a kezdő a^i -re $d_i \cap d = \emptyset$, akkor $a^i \in \gamma_k$ valamely $k \geq 1$ -re. Bármely $x \in d_i$ segítségével megtalálhatjuk γ_k egy további elemét, és véges sok lépésben a teljes γ_k -t. Ezzel a lemmát bizonyítottuk.

A kötések csoportosításának eddig abban láttuk a hasznát, hogy az általános Ising modell (IV.2.1) állapotösszegének és korrelációinak analitikus kiterjesztésére kaphattunk becslést. Más előny is származik, ha az eredményt frusztrációs modellekre alkalmazzuk. Ezt megvilágítandó, vessük össze a (IV.4.7) korrelációkat egy elsőszomszéd kötésekkel ciklikusan kölcsönható négy spinből álló rendszeren, ferromágneses illetve frusztrált kölcsönhatás mellett. Legyen

$$J_{ij} = \pm 1, \quad z = \text{th } \beta. \quad (\text{IV.4.8})$$

A páratlan spin-szorzatok várható értéke 0, a pár-, illetve négy-spin korrelációk kiszámolása elemi. Az eredményt az alábbi táblázat tartalmazza. A korrelációk abszolút értéke nő, ha a hőmérséklet csökken; a maximális ($T \rightarrow 0$) értéket is feltüntettük.

		
$\langle s_i s_{i+1} \rangle$	$\frac{z + z^3}{1 + z^4} \rightarrow 1$	$\pm \frac{z}{1 + z^2} \rightarrow \pm \frac{1}{2}$
$\langle s_i s_{i+2} \rangle$	$\frac{2z^2}{1 + z^4} \rightarrow 1$	0
$\langle s_1 s_2 s_3 s_4 \rangle$	$\frac{2z^2}{1 + z^4} \rightarrow 1$	0

(IV.4.9)

Látható, hogy a frusztrált négyzetben csak első-szomszéd párkorrelációk vannak, és ezek sem nőnek $1/2$ -nél nagyobbra. (Egy frusztrált háromszög esetében $(J_{12}J_{23}J_{31} = -1)$)

$$\langle s_i s_{i+1} \rangle = \pm \frac{z}{1+z+z^2} \rightarrow \pm \frac{1}{3}. \quad (\text{IV.4.10})$$

Ha tehát B első-szomszéd kötésekben áll, és ezek lefedhetők kötések négyzeteivel úgy, hogy egy rácspontra legföljebb két (diszjunkt kötésű) négyzet illeszkedik, akkor a $T_B^d(\zeta)$ polinomokra jó a 3. Lemma becslése, és a hőmérséklet szerinti analitikusság vizsgálatához elég a

$$\{\zeta: |\zeta_{ai}| \leq \frac{1}{2} \text{ minden } a^i \in ([B^i]/G_{B^i}) - G_{B^i}, i = 1, 2, \dots, N\} \quad (\text{IV.4.11})$$

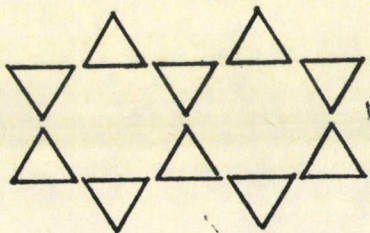
tartományra szorítkozni (háromszögek esetében $1/2$ helyett $1/3$ vehető). A $T(\zeta)$ polinomokkal egy módosított magas-hőmérsékleti sorfejtést vezettünk be, amelynek frusztráció esetén várhatóan jobb a konvergenciája, mint az eredeti, th β szerint haladó sornak. A fejezet további pontjai ezt a megállapítást illusztrálják.

5. Frusztrációs modellek a Kagomé rácson

Egy háromszögekből felépíthető síkrács, amelyben minden pont két háromszöghöz tartozik, a Kagomé rács. Tekintsük az első-szomszéd-kölcsönhatású Ising modellet ezen a rácson. A kötések háromszögeknént csoportosítjuk:

$$B^i = \{b^1, b^2, b^3\} \quad (\text{IV.5.1})$$

ahol b^1, b^2 és b^3 egy háromszöget alkotó első-szomszéd párok. A Kagomé rács kötéseit a (IV.5.1) halmazok lefedik:



A 4. Lemma feltétele teljesül, ezért érvényesek a 3. Lemma becslései. Legyen

$$B = \bigcup_{i=1}^N B^i. \quad (\text{IV.5.2})$$

Ha $b^1 = \{x, y\} \subset B^i$, ahol x és y első szomszédok, akkor

$$\begin{aligned} \zeta_{b^1}(\beta) &= \langle s(x) s(y) \rangle_{B^i, \beta} \\ &= \frac{z_{b^1} + z_{b^2} z_{b^3}}{1 + z_{b^1} z_{b^2} z_{b^3}}. \end{aligned} \quad (\text{IV.5.3})$$

Itt

$$z_{bk} = \text{th } \beta J_{bk}. \quad (\text{IV.5.4})$$

A

$$w_b = \text{th } \beta |J_b| \quad (\text{IV.5.5})$$

és

$$p(i) = \prod_{b \in B^i} \text{sgn } J_b \quad (\text{IV.5.6})$$

jelölésekkel azt kapjuk, hogy

$$\zeta_{b^i} = \text{sgn } J_{b^i} \frac{w_{b^1} + p(i) w_{b^2} w_{b^3}}{1 + p(i) w_{b^1} w_{b^2} w_{b^3}}. \quad (\text{IV.5.7})$$

A továbbiakban feltesszük:

(i)

$$w_b = w_i \quad \text{minden } b \in B^i\text{-re,} \quad (\text{IV.5.8})$$

azaz $|J_b|$ csak attól függ, hogy b melyik háromszögben van. Ekkor

$$\zeta_b = \text{sgn } J_b \frac{w_i}{1 - p(i) w_i + w_i^2} \quad (\text{IV.5.9})$$

(ii) A J_b kölcsönhatások úgy vannak megválasztva, hogy valós hőmérsékletekre létez-
zék

$$\psi(\beta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln T_B \quad (\text{IV.5.10})$$

és

$$\langle s^d \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} T_B^d / T_B \quad (\text{IV.5.11})$$

minden véges d ponthalmazra. Ez teljesül például periodikus kölcsönhatásra. T_B -t (IV.4.4) adja meg; $-\beta\psi(\beta)$ a rendszer szabadenergiájától csak

$$\beta \left(\sum_{b \in B^i} \ln \text{ch } \beta J_b + \ln \left(1 + \prod_{b \in B^i} \text{th } \beta J_b \right) \right) \quad (\text{IV.5.12})$$

alakú tagok átlagában különbözik. Ez nem más, mint a független háromszögek szabadenergiájának átlaga, amely β -nak analitikus függvénye, eltekintve a $T=1/\beta=0$ -beli lényeges szingularitástól. $-\beta\psi(\beta)$ tehát a szabadenergiának az a része, amely a kis alrendszerek (háromszögek) kölcsönhatásából származik.

A fejezet bevezető részében már felírtuk az 1. Tételt. Itt egy kissé módosított alakban újra kimondjuk.

1. Tétel

A fenti feltételek mellett

1. $\psi(\beta)$ analitikus a

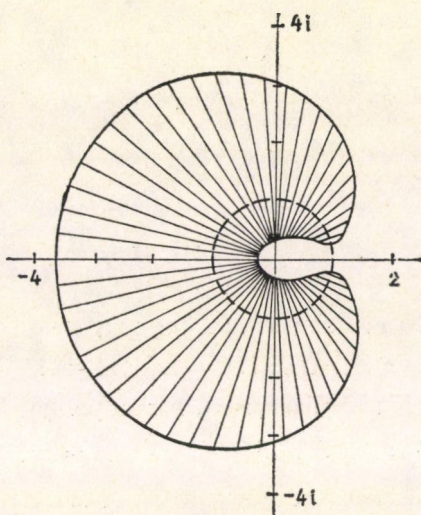
$$D = \{\beta \in \mathbb{C}: |\zeta_b(\beta)| < 0.34 \text{ minden } b\text{-re}\} \quad (\text{IV.5.12})$$

tartományon.

2. Bármely d, d_1, d_2 véges ponthalmazra $\langle s^d \rangle = \langle \prod_{x \in d} s(x) \rangle$ analitikus D -n és ugyanitt

$$|\langle s^{d_1} s^{d_2} \rangle - \langle s^{d_1} \rangle \langle s^{d_2} \rangle| \leq 10^6 e^{-0.09 \varrho(d_1, d_2)} \quad (\text{IV.5.13})$$

ahol $\varrho(d_1, d_2)$ a két halmaz távolsága.



Az ábra a $\left| \frac{w}{1+w+w^2} \right| > 0.34$ tartományt mutatja a komplex w -síkon. A $\beta = \operatorname{Re} \beta \cong 0$ zárt félegyenes képe a $[0, 1]$ szakasz.

Megjegyzések

A tétel a kölcsönhatások egy családjára vonatkozik. Szabadon választhatók a

$$w_i \in [0, 1], \quad p(i) = \pm 1, \quad q(k) = \pm 1 \quad (\text{IV.5.14})$$

paraméterek. Itt

$$q(k) = \prod_{\substack{b \in k\text{-adik} \\ \text{hatszög}}} \operatorname{sgn} J_b. \quad (\text{IV.5.15})$$

A $w_i, p(i), q(k)$ mennyiségeket plakett-változóknak nevezhetjük, mert értékük csak a plakettektől (háromszögek és hatszögek) függ. A $p(i)$ -k és $q(k)$ -k rögzítése a III.1 pont jelölésével megfelel annak, hogy megadunk egy $\varphi \subset F$ végződés-halmazt (a frusztrált plaketteket, melyeken $p(i)$ ill. $q(k) = -1$). Említettük már, hogy két dimenzióban tetszőleges φ -hez létezik az őt realizáló J kölcsönhatás. A (IV.5.14) paraméterek nem határozzák meg egyértelműen J -t, csak egy gauge-ekvivalens osztályt. A (IV.5.11) definíció mutatja, hogy a korrelációkat szabad peremfeltétel mellett tekintjük.

Következmény

Legyen

$$p(i) = -1 \quad \text{minden } B^i\text{-re.} \quad (\text{IV.5.16})$$

Akkor $\psi(1/T)$ és $\langle s^d \rangle(T)$ analitikus minden $T \geq 0$ -ra, és exponenciális klaszterképződés van minden $T \geq 0$ -ra.

A következmény bizonyítása

Ha $p(i) = -1$, akkor $|\zeta_b| \leq 1/3 < 0.34$ minden $b \in B^i$ -re és tetszőleges $T \geq 0$ -ra. Így a teljes $\operatorname{Re} \beta \geq 0$ féltengely a $\operatorname{Re} 1/\beta = 0$ ponttal együtt D belsejében van, és az állítás a tételből következik.

A tétel bizonyítása

Tekintsük először

$$T_B(\zeta) = \sum_{\gamma \in S^{G_B}} \prod_{a \in \gamma} \zeta_a \quad (\text{IV.5.17})$$

becslését. Az előző pontban láttuk (IV.4.6), hogy egy $a \in [B^i]/G_{B^i}$ mellékosztályt egy

$$d \subset b^1 \cup b^2 \cup b^3 = \{x, y, z\} = A_i$$

halmaz reprezentál. x, y és z egy háromszög három pontja,

$$b^1 = \{x, y\}, \quad b^2 = \{y, z\}, \quad b^3 = \{z, x\} \quad (\text{IV.5.18})$$

első-szomszéd párok. A ζ változók indexelhetők ponthalmazokkal, ζ_a helyett írhatunk ζ_d -t. (IV.3.19) szerint $d \subset A_i$ -re

$$\zeta_d = \sum_{\substack{g \subset B^i \\ \circ \{b \in g\} = d}} \prod_{b \in g} z_b / \sum_{\substack{g \subset B^i \\ \circ \{b \in g\} = \emptyset}} \prod_{b \in g} z_b. \quad (\text{IV.5.19})$$

Egy háromszögön belüli szomszéd-párok szimmetrikus differenciája vagy üres vagy egy szomszéd-pár. Ezért $\zeta_d = 0$, ha $d \neq b^1, b^2, b^3$, míg ζ_{b^k} -t (IV.5.3.) adja meg. Ebből következik, hogy egy-egyértelmű megfeleltetés van S^{G_B} elemei és G_B azon elemei — olyan zárt gráfok — között, amelyek tetszőleges háromszögnek legföljebb egy élét tartalmazzák. (Tehát $T_B(\zeta)$ egyenlő $R_B(\zeta)$ egy részletösszegével.) Az ilyen gráfok között nincsenek önmetszők: ez a 4. Lemmának megfelelő állítás.

A (IV.3.25)-tel definiált $N_n(i)$ azon n hosszúságú zárt gráfok száma, amelyeknek van B^i -vel közös éle, és tetszőleges B^j -vel legföljebb egy közös élük van. Könnyen ellenőrizhető, hogy

$$\begin{aligned} N_n(i) &= 0 \quad \text{ha } n \text{ páratlan} \\ &\quad \text{és } n = 2, 4, 8 \\ N_6(i) &= 3 \\ N_{10}(i) &= 15 \\ N_{12}(i) &= 6 \\ N_{2n}(i) &< 2^n \quad \text{ha } n \geq 7. \end{aligned} \quad (\text{IV.5.20})$$

Az N_n felső korlátnak a jobb oldali mennyiségeket választva, a (IV.3.27) egyenlőség kielégíthető az

$$x = 0.34, \quad \varepsilon = 0.1 \quad (\text{IV.5.21})$$

értékekkel. A 3. Lemma szerint

$$0.9^{N-1} \leq |T_B(\zeta)| \leq 1.1^{N-1} \quad (\text{IV.5.22})$$

ha

$$|\zeta_b| \leq 0.34$$

minden $b \in B$ -re. Innen a tétel első állítása a Vitali konvergenciatétellel adódik úgy, ahogy azt a fejezet 2. pontjában megvitattuk.

A második állítás bizonyítása: legyen d a rács véges nemüres pontthalmaza. N -et válasszuk olyan nagyra, hogy $d \subset A$ legyen, ahol

$$A = \bigcup_{i=1}^N \bigcup_{b \in B^i} b$$

Ha a d -nek megfelelő ekvivalencia-osztály Γ , akkor N_n^Γ (v. ö. IV.3.26) azon n hosszú gráfok száma, amelyek d pontjaiban végződnek, zárt-gráf részletet nem tartalmaznak, és tetszőleges B^i -vel legföljebb egy közös élük van. Könnyen belátható, hogy

$$N_n^\Gamma < 2^n. \quad (\text{IV.5.23})$$

Ebből, (IV.3.30)-ból és (IV.5.21)-ből

$$|T_B^d(\zeta)/T_B(\zeta)| \leq \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2 \cdot 0,34}{0,9} \right)^n < 3.2 \quad (\text{IV.5.24})$$

B -től és d -től függetlenül, ha $|\zeta_b| \leq 0.34$. A korrelációk analitikussága Vitali tételéből következik.

Legyenek d_1 és d_2 véges diszjunkt pontthalmazok. Ha $|d_1 \cup d_2|$ páratlan, akkor $\langle s^{d_1 \cup d_2} \rangle \equiv 0$. Ha $|d_1|$ és $|d_2|$ páratlan és Γ a $d_1 \cup d_2$ -nek felel meg, akkor egyrészt fennáll (IV.5.23), másrészt

$$N_n^\Gamma = 0, \quad \text{ha } n < \varrho(d_1, d_2).$$

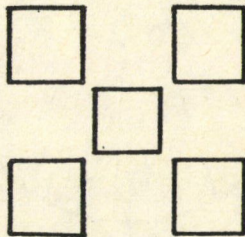
Tehát

$$|\langle s^{d_1 \cup d_2} \rangle| \leq \sum_{n=P(d_1, d_2)}^{\infty} \left(\frac{2 \cdot 0,34}{0,9} \right)^n \leq 5 \cdot 0,76^{P(d_1, d_2)} \quad (\text{IV.5.25})$$

a D tartományon. Ha $|d_1|$ és $|d_2|$ páros, akkor $\langle s^{d_1} \rangle, \langle s^{d_2} \rangle \neq 0$, és (IV.3.30)-ból nem következik az állítás. Mindazonáltal, a becslés ekkor is elvégezhető. Így kapjuk a (IV.5.13)-beli felső korlátot, amely gyengébb (IV.5.25)-nél. A tétel bizonyítását ezzel befejeztük.

6. Frusztrációs modellek a négyzetrácsan

Négyzetrácsan, tisztán első-szomszéd kölcsönhatás esetén a kötéseket négyzetekbe csoportosíthatjuk:



Így a B kötéshalmaz olyan $\{B^i\}_{i=1}^N$ lefedését kapjuk ($B^i = \{b^1, b^2, b^3, b^4\}$), amely a 4. Lemma feltételét kielégíti.

Átvesszük az előző pontból z_b , w_b és p_i (IV.5.4-6) definícióit. A vizsgálatban olyan modellekre szorítkozunk, amelyekben

i)

$$w_b = w_i \text{ minden } b \in B^i\text{-re,}$$

azaz

$$|J_b| = J_i \equiv 0 \text{ ha } b \in B^i; \quad (\text{IV.6.1})$$

ii) minden B^i plakett frusztrált, azaz

$$\prod_{b \in B^i} J_b = J_i^4 p(i) = -J_i^4; \quad (\text{IV.6.2})$$

iii) valós hőmérsékletekre létezik a

$$\psi(\beta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln T_B \quad (\text{IV.6.3})$$

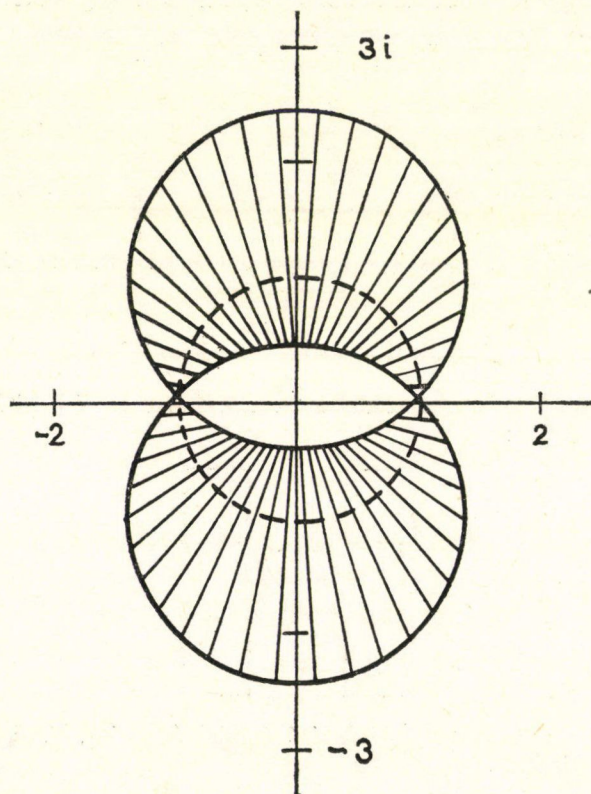
limeszfüggvény.

2. Tétel

A fenti feltételek mellett $\psi(\beta)$ analitikus a

$$\tilde{D} = \{\beta \in \mathbb{C} : |\operatorname{th} \beta J_i / (1 + \operatorname{th}^2 \beta J_i)| < 1/2 \text{ minden } i\text{-re}\} \quad (\text{IV.6.4})$$

tartományon.



Az ábra a $|w/(1+w^2)| \cong 1/2$ tartományt mutatja a komplex w -síkon. A $\beta = \operatorname{Re} \beta \cong 0$ félegyenes képe a $[0, 1)$ szakasz.

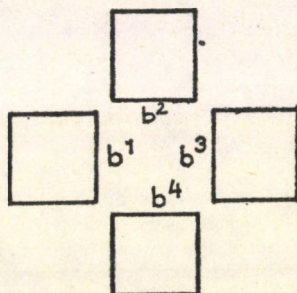
Megjegyzések

Az analitikussági tartomány belsejébe esik minden pozitív hőmérséklet. Ezért a (IV.6.1-2) modellekben nincs fázisátmenet pozitív hőmérsékleten.

Az eredmény a következő modellekre vonatkozik: függetlenül megadhatók a J_i -k (IV.6.1), a „kiegészítő” plaketteken az előjel-szorzatok,

$$q(k) = \prod_{b \in C^k} \operatorname{sgn} J_b \quad (\text{IV.6.5})$$

$$C^k = \{b^1, b^2, b^3, b^4\}$$



továbbá rögzíthető a „gauge”, azaz a $\operatorname{sgn} J_b$ előjelek, kompatibilisen a $p(i)$, $q(k)$ értékekkel. Ezek közül a legérdekesebb adat $q(k)$: például,

$$q(k) \equiv -1 \quad (\text{IV.6.6})$$

a teljesen frusztrált modellre vezet^[II/4], míg

$$q(k) \equiv +1 \quad (\text{IV.6.7})$$

az úgynevezett sakktábla-modellt^[II/8] adja. A tétel e két szélső esetet és az összes közbeesőt azonos módon kezeli. Utóbb kiderült, hogy a teljesen frusztrált és a sakktábla-modellek minőségileg különböznek. A teljesen frusztrált modellben a párkorrelációk az

$$\langle s(x)s(y) \rangle \sim |x-y|^{-1/2} \quad (\text{IV.6.8})$$

törvényt követik nulla hőmérsékleten (Forgács [II/18]; a korrelációk szabad vagy periodikus peremfeltétellel értendő). Ezzel szemben a sakktábla-modellben $T=0$ -n is exponenciálisan csengenek le (Wolff, Zittartz [II/20]), mint a Kagomé-rács megfelelő modelljében.

Bizonyítás

Becslést kell adnunk a $T_B(\zeta)$ polinomra. Ez a ζ_d , $d \in A_i$ változók függvénye, ahol ζ_d az

$$\langle s^d \rangle_{B^t, \beta}$$

korreláció analitikus kiterjesztése. A 4. pontban láttuk (IV. 4.9. képlet), hogy egy frusztrált B^i plaketten

$$\langle s^b \rangle_{B^i, \beta} = \operatorname{sgn} J_b \frac{\operatorname{th} \beta J_i}{1 + \operatorname{th}^2 \beta J_i} \quad (\text{IV.6.9})$$

ha $b \in B^i$, és

$$\langle s^d \rangle_{B^i, \beta} \equiv 0$$

egyébként. Ezért T_B csak a

$$\zeta_b = \operatorname{sgn} J_b \frac{w_i}{1 + w_i^2} \quad (\text{IV.6.10})$$

változók függvénye. Vagyis, ismét *egy-egyértelmű megfeleltetés van S^{G_B} elemei és G_B olyan elemei között, amelyek tetszőleges B^i -nek nem több, mint egy élét tartalmazzák.* Az ilyen gráfok nem önmetszők (v. ö. 4. Lemma), és nyilván

$$N_n(i) < 2^n. \quad (\text{IV.6.11})$$

Ahhoz, hogy a tételt a 3. Lemmával bizonyíthassuk, a (IV.3.27) egyenlőtlenségnek $x=1/2$ mellett kellene teljesülnie. Az

$$N_n = 2^n$$

főlső korlát ezért nyilvánvalóan elégtelen. (Utólag (IV.6.8)-ból tudhatjuk, hogy a bizonyítás ezen az úton nem lehetséges: ha N_n annyira leszorítható lenne, hogy (IV.3.27) kielégüljön $x=1/2$ -del és valamely $\varepsilon < 1$ -gyel, akkor azt kapnánk, hogy minden tárgyalt modellre, így a teljesen frusztráltra is $\psi(1/T)$ és $\langle s^d \rangle(T)$ analitikus $T \geq 0$ -ra és $\langle s(o)s(x) \rangle$ exponenciálisan csökken $|x|$ -szel $T=0$ -n is.) A tényleges bizonyításhoz nem használjuk a 3. Lemma becsléseit, csak $T_B \equiv T_{[N]}$ (IV.3.33) előállítását.

Ahhoz, hogy a bizonyítás áttekinthető legyen, célszerű a jelöléseket egyszerűsíteni. S^G helyett S -et írunk, és ezt úgy tekintjük, mint $G=G_B$ részhalmazát:

$$S = \{g \in G_B: |g \cap B^i| \leq 1\}. \quad (\text{IV.6.12})$$

Értelemszerűen, valamely $\alpha \subset \{1, 2, \dots, N\}$ -re

$$S_\alpha = \{g \in S: |g \cap B^i| = 0 \text{ ha } i \notin \alpha\}. \quad (\text{IV.6.13})$$

Ha

$$\Gamma_d = \{g \subset B: \circ \{b \in g\} = d\} \quad (\text{IV.6.14})$$

akkor $S_\alpha^{\Gamma_d}$ helyett S_α^d -t írunk, és ezt Γ_d részhalmazának tekintjük:

$$S_\alpha^d = \{g \in \Gamma_d: |g \cap B^i| \leq 1 \text{ és } = 0 \text{ ha } i \notin \alpha\}. \quad (\text{IV.6.15})$$

Ennek megfelelően

$$T_\alpha = \sum_{g \in S_\alpha} \zeta^g \equiv T_\alpha^0$$

$$T_\alpha^d = \sum_{g \in S_\alpha^d} \zeta^g \quad (\text{IV.6.16})$$

lépnek T_α^{sg} és T_α^{sf} helyébe. Ezek a polinomok a ζ_b -ken (IV.6.10) keresztül függnek a J kölcsönhatástól. J explicite megjelenik, ha bevezetjük a

$$\xi_i = \frac{w_i}{1 + w_i^2} \quad (\text{IV.6.17})$$

változókat:

$$T_\alpha^d = \sum_{g \in s^d} \text{sgn}(J^g) \xi^g$$

$$J^g = \prod_{b \in g} J_b. \quad (\text{IV.6.18})$$

A (IV.3.31c)-ben definiált t_α^i így írható:

$$t_\alpha^i = \sum_{\substack{g \in s_\alpha \cup \{i\} \\ g \cup B^i \neq \emptyset}} \zeta^g / T_\alpha = \sum_{b \in B^i} \zeta_b \sum_{g \in s} \zeta^g / T_\alpha = \sum_{b \in B^i} \zeta_b T_\alpha^b / T_\alpha \quad (\text{IV.6.19})$$

Ezt is úgy tekintjük, mint a ξ_j komplex változók függvényét. ξ_j „fizikai” tartománya a $[0, 1/2]$ intervallum: ez lesz a β sík $[0, +\infty]$ félegyenesének képe.

Most megmutatjuk, hogy a B^i négyzetek alkalmas számozása esetén

$$|t_{[i]}^{i+1}(\xi)| \leq 1/2 \quad (\text{IV.6.20})$$

minden i -re, ha

$$|\xi_j| \leq 1/2$$

minden j -re.

1) Legyen $0 \leq \xi_j = \text{Re } \xi_j \leq 1/2$, minden j -re. Meg lehet adni egy valós J -t és egy $\beta \geq 0$ valós reciprok-hőmérsékletet, hogy J kielégítse a (IV.6.1—2) feltételeket, és

$$\xi_j = \frac{\text{th } \beta |J_j|}{1 + \text{th}^2 \beta |J_j|} \quad (\text{IV.6.21})$$

legyen. Ha

$$B_\alpha = \bigcup_{j \in \alpha} B^j,$$

akkor (IV.4.5) és (IV.6.19) szerint

$$t_\alpha^i(\xi) = \sum_{b \in B^i} \zeta_b \langle s^b \rangle_{B_\alpha} \quad (\text{IV.6.22})$$

és

$$|\zeta_b| \leq 1/2, \quad |\langle s^b \rangle_{B_\alpha}| \leq 1.$$

Jelölje $n(i, \alpha)$ B^i és B_α közös rácsponthainak számát, azaz

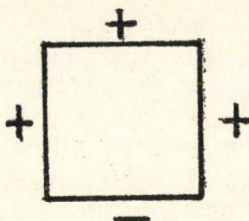
$$n(i, \alpha) = |(\bigcup_{b \in B^i} b) \cap (\bigcup_{b \in B_\alpha} b)|. \quad (\text{IV.6.23})$$

Nyilván $n(i, \alpha) \leq 4$. Ha $n(i, \alpha) \leq 3$, akkor $\bigcup_{b \in B^i} b$ és $\bigcup_{b \in B_\alpha} b$ legföljebb két közös elsőszomszéd párt képezhet, ha pedig $n(i, \alpha) \leq 2$, akkor legföljebb egyet. Ezért

$$|t_\alpha^i(\xi)| \leq 1, \quad \text{ha } n(i, \alpha) \leq 3$$

$$\leq 1/2, \quad \text{ha } n(i, \alpha) \leq 2. \quad (\text{IV.6.24})$$

2) Kitüntetett szerepet játszik a következő kölcsönhatás: minden B^i -ben a négyzet alsó élén negatív a kötés, a többi élen pozitív.



A szimbólumok fölé írt hullámmal (\sim) jelölöm, hogy az adott mennyiség a kitüntetett kölcsönhatáshoz (\tilde{J}) tartozik.

$$\tilde{p}(i) = \tilde{q}(k) = -1$$

minden B^i és C^k plakettre, a modell teljesen frusztrált. Mivel minden $g \in S$ -re g zárt gráfok uniója, azért

$$T_\alpha[J] = T_\alpha[\tilde{J}]$$

minden olyan J -re, amely gauge-ekvivalens \tilde{J} -mal (v.ö. II. fejezet) — azaz minden teljesen frusztrált modellre. (Ezzel szemben

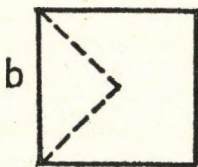
$$T_\alpha^d[J] = T_\alpha^d[\tilde{J}]$$

általában nem áll fenn.) A \tilde{J} kölcsönhatásra igaz a következő állítás: tetszőleges $g \in \inf S$ -re

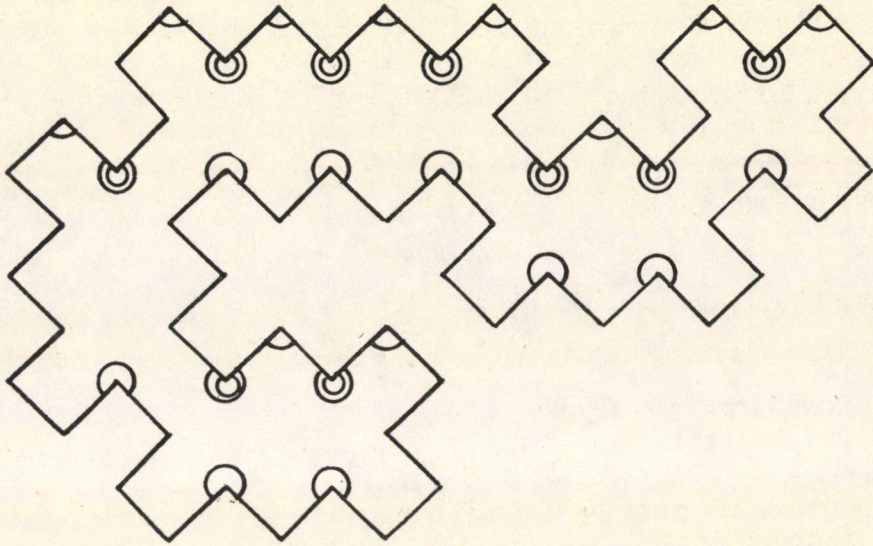
$$\text{sgn } J^g = -1 \quad (\text{IV.6.25})$$

($\text{sgn } J^g$ gauge-invarianciája miatt ugyanez igaz minden teljesen frusztrált kölcsönhatásra). Ezt így láthatjuk be:

$\inf S$ elemeinek van egy nagyon szemléletes ábrázolása. Ha $b \in g \in \inf S$, akkor $b \in B^i$ valamely i -re, és B^i -nek ez az egyetlen g -beli eleme. Rajzban b -t egy ráemelt, B^i középebe mutató ékkel reprezentáljuk:



Az ékek egy olyan, 45° -kal elforgatott négyzethálóra rajzolt zárt vonallá állnak össze, amelynek minden rácspon fordulóponja. Egy kellően bonyolult $\inf S$ -beli elemet mutat az alábbi ábra:



A negatív kötéseknek az egyíves — alulról konvex — szögtartományok felelnek meg. A különféle szögtartományok számai között szimmetria miatt fennállnak az alábbi összefüggések: ha $N_{1,-}$ az egyíves és 180 foknál kisebb, $N_{1,+}$ az egyíves és 180 foknál nagyobb, N_2 pedig a kétíves szögek száma, akkor

$$N_{1,-} = N_2 + 1$$

$$N_2 = N_{1,+} \quad (\text{IV.6.26})$$

Innen azt kapjuk, hogy

$$N_{1,-} = N_{1,+} + 1,$$

vagyis $N_{1,-} + N_{1,+} = \{\text{a negatív kötések száma}\}$ páratlan. Ez ekvivalens (IV.6.25)-tel. Fontos következmény:

Legyen $0 \leq \xi_j = \text{Re } \zeta_j \leq 1/2$ minden j -re. Akkor

$$\tilde{t}_\alpha^i(\xi) \leq 0. \quad (\text{IV.6.27})$$

Ezt a következőképpen láthatjuk be. (IV.3.34)-ből és (IV.6.26)-ból

$$\tilde{t}_\alpha^i = - \sum_{\substack{\theta \in \inf S_{\alpha \cup \{i\}} \\ \theta \cap B^i \neq \emptyset}} \left(\prod_{\theta \cap B^j \neq \emptyset} \zeta_j \right) \Big/ \prod_{k=2}^{|g|} (1 + \tilde{t}_{\alpha - \text{supp } g}^{jk}) \quad (\text{IV.6.28})$$

Itt

$$\text{supp } g = \{k \in \{1, 2, \dots, N\} : g \cap B^k \neq \emptyset\}. \quad (\text{IV.6.29})$$

Mivel $|g \cap B^k| = 1$, ha $k \in \text{supp } g$, azért $|\text{supp } g| = |g|$. Legyen $|\text{supp } g| = n$. g az első-szomszéd párok zárt gyűrűje, ezért $\text{supp } g$ pontjai sorbarendezhetők

$$\text{supp } g = \{j_1, j_2, j_3, \dots, j_n\} \quad (\text{IV.6.30})$$

úgy, hogy $j_1 = i$, és

$$B^i \text{ és } B^{j_2}, B^{j_2} \text{ és } B^{j_3}, \dots, B^{j_n} \text{ és } B^i$$

tartalmaz egy rácspontban csatlakozó éleket. (IV.6.28)-ban j_k -t ez definiálja, továbbá

$$\text{supp } g'k = \{j_2, \dots, j_k\}. \quad (\text{IV.6.31})$$

$\text{supp } g$ fenti sorbarendezeése implikálja, hogy

$$n(j_k, \alpha - \text{supp } g'k) \leq 3,$$

mert a B^{j_k} -val szomszédos négy négyzet között van B^{j_k-1} , és

$$j_{k-1} \notin \alpha - \text{supp } g'k.$$

Következésképpen, (IV.6.24)-ből

$$|\tilde{t}_{\alpha - \text{supp } g'k}^{j_k}(\xi)| \leq 1, \quad (\text{IV.6.32})$$

(IV.6.28) nevezője pozitív, és (IV. 6.27) igaz.

3) Bevezetjük a

$$|\xi| = \{|\xi_j|\}_{j=1}^N \quad (\text{IV.6.33})$$

jelölést. Tegyük fel, hogy $|\xi_j| \leq 1/2$ minden $1 \leq j \leq N$ -re. Akkor

$$|t_{\alpha}^i(\xi)| \leq -\tilde{t}_{\alpha}^i(|\xi|) \quad (\text{IV.6.34})$$

ahol t_{α}^i tetszőleges olyan J kölcsönhatáshoz tartozik, amely \tilde{J} -tól csak előjelekben különbözik, és melyre

$$\prod_{b \in B^i} J_b \leq 0.$$

A (IV.6.34) egyenlőtlenség $|\alpha|$ szerinti teljes indukcióval bizonyítható. Ha $|\alpha| < 3$, akkor $t=0$. Ha $\alpha = \{1, 2, 3\}$, és B^1, B^2, B^3, B^4 ciklikusan csatlakozó négyzetek, akkor

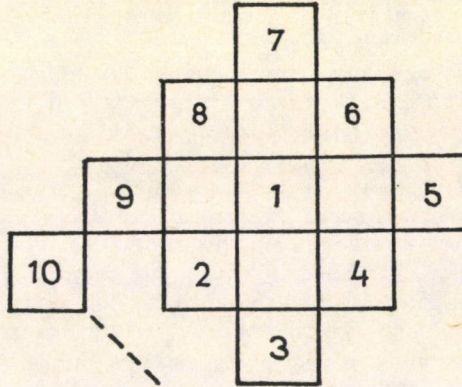
$$|t_{\{1, 2, 3\}}^4| = |\xi_1| \cdot |\xi_2| \cdot |\xi_3| \cdot |\xi_4| = -\tilde{t}_{\{1, 2, 3\}}^4(|\xi|).$$

Általában,

$$\begin{aligned} |t_{\alpha}^i(\xi)| &\equiv \sum_{\substack{g \in \text{inf } S_{\alpha \cup \{i\}} \\ g \cap B^i \neq \emptyset}} \prod_{g \cap B^j \neq \emptyset} |\xi_j| / \prod_{k=2}^{|g|} |1 - \tilde{t}_{\alpha - \text{supp } g'k}^{j_k}(\xi)| \\ &\equiv \sum_{\substack{g \in \text{inf } S_{\alpha \cup \{i\}} \\ g \cap B^i \neq \emptyset}} \prod_{g \cap B^j \neq \emptyset} |\xi_j| / \prod_{k=2}^{|g|} |1 + \tilde{t}_{\alpha - \text{supp } g'k}^{j_k}(|\xi|)| = -\tilde{t}_{\alpha}^i(|\xi|). \end{aligned}$$

A második egyenlőtlenséghez használtuk az indukciós feltevést és (IV.6.32)-t.

4) A (IV.6.20) egyenlőtlenség bizonyításának utolsó lépéseként tekintsük a négyzetrács első-szomszéd párijait lefedő $\{B^1, B^2, \dots\}$ végtelen négyzethalmaz. A négyzeteket megszámozzhatjuk úgy, hogy rácspontokban csatlakozó végtelen spirált alkossanak.



Ekkor

$$n(i+1, [i]) \leq 2,$$

és (IV.6.24)-ből következik, hogy

$$-i_{[i]}^{i+1}(|\xi|) = |i_{[i]}^{i+1}(|\xi|)| \leq 1/2, \quad (\text{IV.6.35})$$

feltéve, hogy $|\xi_j| \leq 1/2$ minden j -re. Ez viszont (IV.6.34)-gyel együtt implicálja, hogy

$$|i_{[i]}^{i+1}(\xi)| \leq 1/2.$$

$T_{[T]}$ (IV.3.33) előállításából

$$(1/2)^{N-1} \leq |T_{[N]}(\xi)| \leq (3/2)^{N-1},$$

ha $|\xi_j| \leq 1/2$ minden j -re. Ebből Vitali tételével bizonyítható $\psi(\beta)$ analitikussága.

7. „Szuperfrusztráció”

A fejezet első tételének következménye volt, hogy ha a Kagomé rácson egy első-szomszéd Ising modellben minden háromszög-plakett frusztrált, akkor a szabad-energia és korrelációk analitikussági tartománya (a hőmérséklet függvényében) tartalmazza $T=0$ -t. Ez merőben szokatlan jelenség, mert úgy értelmezhető, hogy ezeknek a modelleknek negatív a kritikus hőmérséklete (lásd az 1. Tételhez tartozó ábrát). Azokban a jól ismert esetekben, amikor nincs pozitív hőmérsékleten fázisátmenet — például amiatt, hogy a dimenziószám alacsony — a kritikus hőmérséklet nulla. Ez azt jelenti, hogy $T \rightarrow 0$ esetén a korrelációs hossz végtelenhez tart, az exponenciális klaszterképződést hatványtörvényt követő lecsengés váltja fel. Mint láttuk, nem ez a helyzet a Kagomé-modellekkel. E furcsa viselkedés oka egyértelműen a frusztráció rendkívüli hatékonyságában keresendő. A jelenség nem korlátozódik az 5. pontban ismertetett modellekre. Frusztrált háromszögek és négyszetek csúcsokon át való illesztésével tetszőleges dimenzióban konstruálhatunk olyan modelleket, amelyek „szuperfrusztráltak” lesznek (azaz $T=0$ is analitikussági pontjuk): ehhez nem kell egyéb, mint eléggé gyengén összefüggőre definiálni a plakettek hálózatát ahhoz, hogy a (IV.3.27) egyenlőtlenség kielégíthető legyen valamely $x > 1/2$ és $\varepsilon < 1$ értékpárral. A háromszögek és négyszögek helyettesíthetők több kötést tartalmazó frusztrált

plakettel, illetve bizonyos hányadban nem-frusztráltakkal is, azon az áron, hogy csökkentjük a hálózat összefüggőségét.

A szuperfrusztráció egy szükséges feltétele, hogy nulla hőmérsékleten, szabad peremfeltétel mellett exponenciális klaszterképződés legyen. Ennek megállapításához elég a modell alapállapotait vizsgálni. Bizonyos kvalitatív jegyek alapján valószínűsíthetjük, hogy a modell szuperfrusztrált-e avagy sem.

Az alapállapot fogalmát a III.1 pontban definiáltuk. Szavakban megfogalmazva, az alapállapot olyan spinkonfiguráció, amelynek az energiája lokális transzformációkkal nem csökkenthető. *Iszoláltnak* nevezzük az olyan alapállapotot, amelynek energiáját minden lokális transzformáció megnöveli. Azt mondjuk, hogy az alapállapotok halmaza összefüggő, ha bármely két s, s' alapállapothoz létezik az alapállapotok egy sorozata, $s_1, s_2, \dots, s_n, \dots$ úgy, hogy s_n és s_{n+1} véges sok pontban különbözik, $s_1 = s$ és s_n tart s' -höz pontonként (bármely x rácsponthoz létezik $n(x)$, hogy $s_n(x) = s'(x)$ ha $n > n(x)$). Megkockáztathatjuk a következő hipotézist: *egy modell, amelynek egynél több alapállapota van, szuperfrusztrált akkor és csak akkor, ha az alapállapotok halmaza összefüggő.*

Itt szuperfrusztráción pontosan a következőt értjük: a korrelációk a hőmérséklet analitikus függvényei $T=0$ -n, és a klaszterképzés exponenciális a szabad peremfeltételű fázisban.

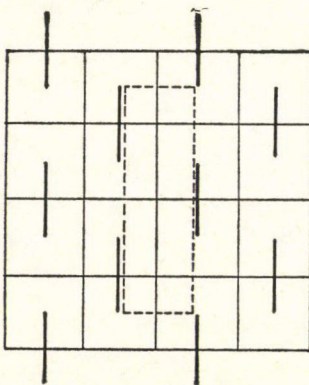
Ezt az állítást nem tudom bizonyítani, legfőljebb megindokolni:

Ha az alapállapotok halmaza összefüggő, akkor nulla hőmérsékleten egyetlen fázis van, és ez feltehetően az egyetlen magas hőmérsékleti fázis analitikus folytatása $T=0$ -ra. Ha a klaszterképzés nem lenne exponenciális, akkor a korrelációs hossz végtelen lenne, és ez implikálni látszik, hogy az alapállapotok degenerációja a peremfeltétel segítségével aszimptotikusan (a végtelen térfogat határesetében) is felhasítható. Ez viszont ellentmond annak, hogy az alapállapotok halmaza összefüggő.

Fordítva, ha $T=0$ -n a klaszterképzés exponenciális a szabad peremfeltételű fázisban, akkor ez a fázis ergodikus, ezért az alapállapotok halmaza összefüggő kell legyen.

A hipotézist ellenőrizhetjük az 5. és 6. pontban tárgyalt modelleken.

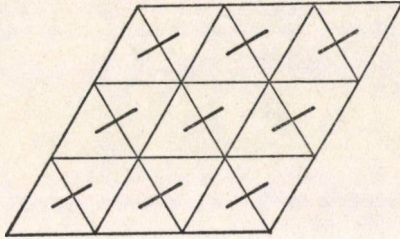
Az alapállapotok halmaza nyilván nem összefüggő, ha van izolált alapállapot. A négyzetrács teljesen frusztrált modelljében könnyen találhatók izolált alapállapotok. Egy ilyen konfiguráció Ω határát (a határ a kielégítetlen kötések halmaza, v.ö. III.1 pont) mutatja a következő ábra:



A lokális gerjesztések kontúrhalmozokkal reprezentálhatók. Látható, hogy tetszőleges Γ kontúrnak az Ω_0 -hoz viszonyított energiája,

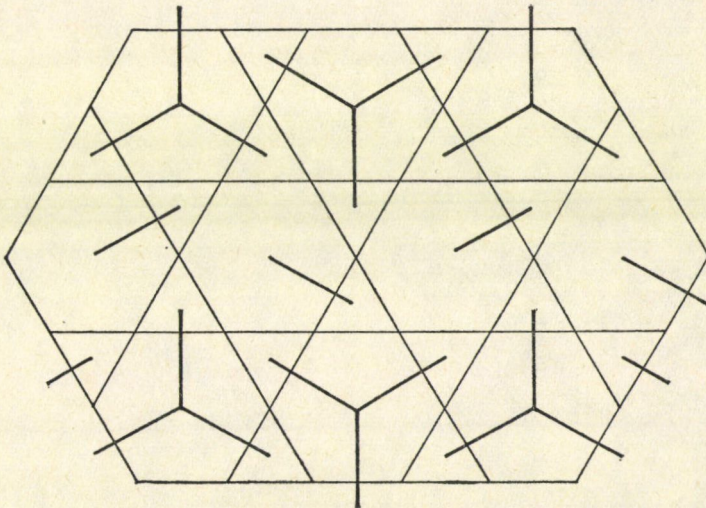
$$k(\Gamma|\Omega_0) = |\Gamma - \Omega_0| - |\Gamma \cap \Omega_0| > 0.$$

A háromszögrácson az antiferromágneses modell teljesen frusztrált, és itt is van izolált alapállapot:



A hipotézis azt jósolja, hogy a négyzet- és háromszögrácson a teljesen frusztrált modell nem szuperfrusztrált. *Stephenson* [II/27] és *Forgács* [II/18] számolásaiból tudjuk, hogy a párkorrelációk $T=0$ -n a (IV.6.8) törvényt követik.

Jóval nehezebb azt bizonyítani, hogy valamely modellben az alapállapotok halmaza összefüggő. Erre nem ismerek módszert. Megpróbálhatunk izolált alapállapotot találni, és bizonyos esetekben azt tapasztaljuk, hogy ez nem sikerül. Ez a helyzet a Kagomé-rács modellekkel is. A teljesen frusztrált Kagomé-rács modell egy nem-izolált alapállapotát mutatja a következő ábra (minden spin körül van nulla-energiájú kontúr).



Wolff a fentebb ismertetett hipotézis alapján valószínűsítette, hogy a sakktábla-modell és a méhsejtrácson a teljesen frusztrált modell szuperfrusztrált. Utóbbi ezt *Wolff* és *Zittartz* [II/20, II/23] a párkorrelációk kiszámolásával bizonyította is.

Frustráció felléphet antiferromágneses párkölcsönhatás és külső tér versengésekor is. Ez a helyzet a d -dimenziós egyszerű köbös rácson, Z^d -n, tehát a

$$H_h = \sum_{\langle xy \rangle} s(x)s(y) - h \sum s(x) \quad (\text{IV.7.1})$$

modellben, ahol $\langle xy \rangle$ első-szomszéd pár. Az antiferromágneses modell zérus külső térben frusztrálatlan. h nem-nulla értékeire megjelenik a versengés. Ha $0 < h < 2d$, akkor H_h alapállapota a két antiferromágneses konfiguráció, ha $h > 2d$, akkor az egyetlen alapállapot $s \equiv \pm 1$. $h = 2d$ -re alapállapot minden olyan konfiguráció, amelyben nincsenek szomszédos negatív spinek. Érdekes lenne ellenőrizni a hipotézist a H_{2d} modellen. Nagyon valószínű, hogy az alapállapotok egyetlen összefüggő halmazt alkotnak. (Az könnyen látható, hogy a két antiferromágneses és az $s \equiv +1$ konfiguráció az alapállapotok ugyanazon összefüggő halmazába esik.) A hipotézis szerint $T=0$ -ban analitikus korrelációkat és exponenciális klaszterképződést kellene kapnunk. Egy dimenzióban, tehát a

$$H = \sum_{x \in \mathbb{Z}} s(x)s(x+1) - 2 \sum s(x) \quad (\text{IV.7.2a})$$

modellben az exponenciális klaszterképzés $T=0$ -n könnyen igazolható. A Hamilton-függvény írható a

$$H = \sum_x s(x)s(x+1) - \sum_x s(x)(s_{\alpha(x)} + s_{\beta(x)}) \quad (\text{IV.7.b})$$

alakban, ahol az újonnan bevezetett spinek „be vannak fagyasztva”,

$$s_{\alpha(x)} = s_{\beta(x)} = 1.$$

A nulla-hőmérsékleti mágnesezettséget a III. fejezetben a Longa—Oles modell kapcsán kiszámoltuk,

$$\langle s(x) \rangle = 1/\sqrt{5}.$$

Az ott nyert eredményekből könnyen megkapható $\langle s(0)s(x) \rangle$ is. Legyen n_k a k hosszúságú lánc alapállapotainak száma. A III. fejezetből

$$n_k = \frac{2\sqrt{5}+4}{5+\sqrt{5}} \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2} \right)^k - \frac{2\sqrt{5}-4}{5-\sqrt{5}} \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2} \right)^k. \quad (\text{IV.7.3})$$

Ha az $L=k+l+x+1$ hosszúságú láncban k spin van $s(x)$ fölött, és l spin $s(0)$ alatt, akkor

$$\begin{aligned} \text{Prob}(s(0) = s(x) = 1) &= n_k n_l n_{x-1} / n_L \\ \text{Prob}(s(0) = s(x) = -1) &= n_{k-1} n_{l-1} n_{x-3} / n_L \\ \text{Prob}(s(0) = -s(x) = 1) &= n_{k-1} n_l n_{x-2} / n_L \\ \text{Prob}(s(0) = -s(x) = -1) &= n_k n_{l-1} n_{x-2} / n_L. \end{aligned} \quad (\text{IV.7.4})$$

Ide (IV.7.3)-t beírva és a $k, l \rightarrow \infty$ átmenettel

$$\langle s(0)s(x) \rangle - \langle s(0) \rangle \langle s(x) \rangle = \frac{4}{5} \left(\frac{1-\sqrt{5}}{1+\sqrt{5}} \right)^x \quad (\text{IV.7.5})$$

tehát a klaszterképzés valóban exponenciális.

V. ÖSSZEFOGLALÁS

A disszertációban az első-szomszéd párkölcsönhatású Ising frusztrációs modelleket vizsgáltam egzakt matematikai módszerekkel. A téma azért érdekes a fizika számára, mert a rendezetlen rendszerek és ezen belül a spinűvek mikroszkópikus leírásához ezek az egyszerű modellek jól használhatók. A matematikai egzaktaságot részben megköveteli az a tény, hogy a közelítő eredmények gyakran ellentmondóak és általában kevésbé megbízhatóak, mint a frusztráció-mentes esetben. (Utalok itt az átlagtér-elmélet nehézségeire ^(1/4).) Másrészt, az ilyen természetű vizsgálatok jól beilleszkednek a matematikai statisztikus fizika egy természetes fejlődési vonalába.

Az eredményeimet öt tételben foglaltam össze, amelyeket egy állítás és hét lemma szolgál ki. Mindezek két fő kérdéskörrel foglalkoznak:

1. A III. fejezetben (három tétel, egy állítás, három lemma) a fázisátmenet létezésének feltételét vizsgálom. Az első tétel a Peierls érvelést általánosítja frusztráció esetére tetszőleges dimenzióban, és tipikusan olyan modellekre vonatkozik, amelyekben zérus ponti entrópia van. A három tételt együtt tekintve, a kétdimenziós frusztrált modelleknek két családjára lehetett bizonyítani a fázisátmenet (alacsony hőmérsékleti spontán szimmetriasértés) létezését:

- Olyan modellek, amelyeknek alapállapotában a szabadon, energiaköltség nélkül megfordítható spinek korlátos méretű klasztereket alkotnak. Ezek közé tartoznak azok a modellek, amelyekben a frusztrált négyzetek által alkotott klaszterek (klaszter = első-szomszédokon át összefüggő halmaz) mérete korlátos, és mindegyikben páros sok négyzet van.
- Régeesen frusztrált modellek, amelyekben a frusztrált négyzetek halmaza pl. függőleges irányban eltolás-invariáns, vízszintes irányban pedig szeparált oszloppárokat alkot:

x	x		x	x			x	x			x	x	
---	---	--	---	---	--	--	---	---	--	--	---	---	--

2. A IV. fejezetben (két tétel, négy lemma) a fázisátmenet hiányának feltételét keresem. A vizsgálati módszer Lee-Yang ihletésű, vagyis a termodinamikai függvényeket a komplex hőmérsékleti síkra terjesztem ki, analitikus tulajdonságaikat ott vizsgálom. Új módszert dolgoztam ki (erről szól a négy lemma) állapotösszegek és korrelációk kiterjesztéseinek becslésére; ez a módszer a frusztráció problémájára van kiélezve, erre adja a legjobb eredményeket. A módszert példaként két modellcsaládra alkalmaztam. Az egyik a négyzetrács sakktábla- és teljesen frusztrált modelljét és az összes, közbeeső frusztrációfokú modellt tartalmazza. Ezekre megmutattam, hogy nem szenvednek fázisátmenetet pozitív hőmérsékleten. A másik modellcsalád tagjai a Kagomé rácson a teljesen frusztrált és az antiferromágneses modell közé esnek (a frusztráció szempontjából), tehát minden háromszög frusztrált, a hatszögek vagy frusztráltak vagy nem. Ehhez a modellcsaládhoz sorolhatók az olyan $v \geq 2$ dimenziós első szomszéd kölcsönhatású modellek, amelyekben a kötések lefedhetők frusztrált háromszög-plakettekkel, és e plakettek „kellően” gyengén összefüggő hálózatot alkotnak. Ezekre a modellekre megmutattam, hogy bennük semmilyen fizikailag értelmes hőmérsékleten ($T=0$ -t is ideértve) nincs fázisátmenet, a szabadenergia és a korrelációk analitikusak, és az utóbbiak exponenciálisan csengenek le minden $T \geq 0$ hőmérsékleten. Ez a frusztráció eddig ismert legszélsőségebb hatása.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A disszertáció tárgyát képező munkák egy viszonylag rövid, kétéves periódusban, 1979 és 1981 között készültek. Megelőzte őket egy tanuló-időszak, melyben a matematikai statisztikus fizika szel­lemét és néhány eredményét igyekeztem elsajátítani. Ebben nagy segítségemre volt akkori munkahelyi vezetőimnek, *Kósa Somogyi Istvánnak* és *Hargitai Csabának* jóindulatú türelme, az állandó inspiráló kapcsolat a KFKI Szilárdtest-elméleti Osztályának kollektívájával és kiváltképpen *Fazekas Patrikkal*, továbbá az a tény, hogy részt vehettem a Matematikai Kutató Intézet *Szász Domokos* és *Fritz József* által szervezett statisztikus fizikai szemináriumain. Ezúton fejezem ki köszönetemet mindannyiuknak. *Sólyom Jenőnek* és *Fritz Józsefnek* külön köszönöm a disszertáció kéziratának alapos és értő elolvasását és értékes kritikái megjegyzéseiket. Végül, de nem utolsósorban köszönöm *Siklós Tivadarnak*, a KFKI Szilárdtest-elméleti Osztálya vezetőjének állandó bátorítását és támogatását, amelynek felbecsülhetetlen szerepe volt a disszertáció gyors megírásában.

IRODALOM

az I. fejezethez

1. Edwards S. F., Anderson P. W., J. Phys. F 5, 965, 1975.
2. Mattis D. C., Phys. Letters A 56, 421, 1976.
3. Spinüveg-kísérletek
 - a) A spinüvegek archetipusa a híg mágneses ötvözet, mint a CuMn vagy az AuFe; lásd például Owen J., Browne M., Knight W. D., Kittel C., Phys. Rev. 102, 1501, 1956.
Arrott A., J. Appl. Phys. 36, 1093, 1965.
Violet C. E., Borg R. J., Phys. Rev. 149, 540, 1966.
Cannella V., Mydosh J. A., Phys. Rev. B 6, 4220, 1972.
Nagato S., Keesom P. H., Harrison H. R., Phys. Rev. B 19, 1933, 1979.
 - b) Mágneses ötvözetek, amelyekben a mágneses atom koncentrációja nagy. A mágneses atom nem feltétlenül átmeneti fém, lehet rigka földfém is. Példa az amorf $Gd_{0,37}Al_{0,63}$, a $(Ha_{1-x}Gd_x)Al_2$, lásd
Mizoguchi T., McGuire T., Gambino R., Kirkpatrick S., Phys. Rev. Letters 38, 89, 1977.
Nieuwenhuys G. J., Verbeek B. H., Mydosh J. A., J. Appl. Phys. 50, 1685, 1979.
Tholence J. L., Solid State Comm. 35, 113, 1980.
Löhneysen H. V., Tholence J. L., Stegkucg F., Z. Phys. B 29, 319, 1978.
A fémekben (a) és b) pont) a spinek között hosszútávú oszcilláló (RKKY) kölcsönhatás van, a frusztráció ezen keresztül lép fel.
 - c) Szigetelő anyagok. Ezekben többnyire első-szomszéd ferromágneses kölcsönhatás verseng másod-szomszéd antiferromágneses kölcsönhatással. Ilyen anyag az $Eu_xSr_{1-x}S$, lásd például Maletta H., Felsch W., Phys. Rev. 20, 1245 (1979).
Maletta H., J. Physique Colloq. 41, C5 115, 1980).
 - d) Amorf anyagok. A spinüveg nem szükségszerűen szubsztitúciós ötvözet. Erre példa a b)-ben említett amorf $Gd_{0,37}Al_{0,63}$, lásd még
Ferré J., Pommier J., Renard J. P., Knorr K., J. Phys. C 13, 3697, 1980.
Renard J. P., Miranday J. P., Varret F., Solid State Comm. 35, 41, 1980.
 - e) A spin helyett a kölcsönható momentum lehet elektromos dipól, például a $L(Li)TaO_3$ -ban: Borsá F., Höchli U. T., van der Klink J. J., Rytz D., Phys. Rev. Letters 45, 1884, 1980.
vagy kvadrupól,
Sullivan N. S., Devoret M., Cowan B. P., Urbina C., Phys. Rev. B 17, 5016, 1978.
4. Spinüveg átlagtér-elmélete: 1. és
Sherrington D., Kirkpatrick S., Phys. Rev. Letters 35, 1792, 1975.
Thouless D. J., Anderson P. W., Palmer R., Phil. Mag. 35, 593, 1977.
de Almeida J. R., Thouless D. J., J. Phys. A 11, 983, 1978.
Parisi G., Phys. Reports 67, 25, 1980.
Parisi G., Toulouse G., J. Physique Lettres 41, L361, 1980.
Vannimenus J., Toulouse G., Parisi G., J. Physique 42, 565, 1981.
Toulouse G., Gabay M., Lubensky T. C., Vannimenus J., J. Phys. Lettres 43, L109, 1982.
5. Összefoglalók
Mydosh J. A., A. I. P. Conf. Proc. 24, 131, 1975.
Mydosh J. A., Amorphous Magnetism II, szerk. R. A. Levy, R. Hasegawa (Plenum, 1977).
Mydosh J. A., J. M. M. M. 7, 237, 1978.
Mydosh J. A., Liquid and Amorphous Metals, szerk. E. Lösscher, H. Coufal (Sijthoff and Nordhoff, 1980).
Souletie J., J. Physique Colloq. 39, C 2—3, 1978.
Blondin A., J Physigul bollog, 39, 6 1499, 1978
Murani A. P., ugyanott, 1517.
Beck P. A., Progr. Mat. Sci. 23, 1, 1978.
Binder K., Festkörperprobleme (Advances in Solid State Physics), szerk. J. Treusch (Vieweg, Brannschweig, 1977) Vol. XVII, 55.
Binder K., Fundamental Problems in Statistical Mechanics, szerk. E. G. D. Cohen (North-Holland, 1980).
Joffrin J., La matière mal condensée. Ill-condensed Matter, szerk. Balian R., Maynard R., Toulouse G. (North-Holland, 1979).
Anderson P. W., ugyanott.
Kirkpatrick, S., ugyanott.
Lubensky T. C., ugyanott.

de Dominicis C.: *Dinamical Critical Phenomena and Related Topics*, Lecture Notes in Physics 104- Springer, 1979.

Rammal R.: *Les verres de spin: théorie*, Les Houches, 1980 február, North-Holland.

Toulouse G., Frustration et désordre: problèmes nouveaux en mécanique statistique. Histoire des verres de spin, Troisième cycle de la physique en Suisse Romande, 1981.

Fischer K. H., *Physica Status Solidi* 1983

6. A disszertáció alapjául szolgáló publikációk

a) a III. fejezethez

Sütő A., Phase transitions for Ising frustration potentials, *J. Stat. Phys.* 23, 203—217, 1980,

Sütő A., Phase transitions for Ising frustration potentials (Ising models with zero point entropy), *Proc. Conf. on Random Fields: Rigorous Results*, Esztergom, 1979, szerk. Szász D. és Fritz J. North-Holland-Akadémiai Kiadó, 1981. 1011—1017.

Sütő A., Phase transition in Ising frustration models, *Proc. of the Brasov International School on Recent Advances in Statistical Mechanics*, Brasov 1979 (Central Institute of Physics, Bucharest) 433—439.

Sütő A., Magnetization in some frustration models, *J. Phys. A* 14, 2733—2740, 1981.

Sütő A., Entropy-energy arguments for frustration, *Helvetica Physica Acta* 54, 650, 1981 (Conf. Abstract).

Ueno Y., Sütő A., Spin-spin correlation in some frustration models, *Proc. of the International Conference on Magnetism*, Kyoto 1982, *J. M. M. M.* 31—34, 1111—1112, 1983.

Sütő A., Dual transformation for Ising spin glasses, *KFKI* 1978—95.

b) a IV. fejezethez

Sütő A., Bounds on partition functions and some applications, *Helv. Phys. Acta* 53, 662, 1980, (Conf. Abstract)

Sütő A., Bounds on Ising partition functions I., *Helv. Phys. Acta* 54, 191—200, 1981.

Sütő A., Bonds on Ising partition functions II: Application to frustration., *Helv. Phys. Acta* 54, 201—213, 1981.

Sütő A., Models of superfrustration, *Z. Phys. B* 44, 121—127, 1981.

7. Ezt a kijelentést érdemes részletesebben kifejteni. Az egyes kötések erősségét és előjelét a szóbanforgó spineket hordozó atomok relatív helyzete határozza meg. Az atomi pozíciók kellően magas hőmérsékleten maguk is változhatnak, ezért a kötések olyan szabadsági fokok, amelyek magas hőmérsékleten termikus egyensúlyra jutnak a környezetükkel, így az egyéb kötésekkel és a spinekkel. A hőmérsékletet csökkentve a kötések az atomi diffúzióval együtt „befagynak”. A befagyási hőmérséklet, T_f , az a legalacsonyabb hőmérséklet, amelyen a termikus egyensúly még fennáll. Ez alatt a hőmérséklet alatt a kötések eloszlása rögzített és megfelel az egyensúlyi eloszlásnak T_f -en. A modellezés szempontjából célszerű T_f -et végtelennek választani: ennek az felel meg, hogy a kötések független eloszlásúak. Ha T_f végtelen, a kötések összefüggők lesznek, és a J konfiguráció valószínűsége

$$P(J) \sim \exp \{ -F(J, T_f)/T_f \},$$

ahol $F(J, T)$ a spinrendszer szabadenergiája T hőmérsékleten és J kötés mellett. Ebből könnyen belátható, hogy $T_f = 0$ -n $P(J)$ egyenlő súllyal koncentrálódik azon J -kre, amelyek minimalizálják $F(J, 0)$ -t, és ezek éppen a frusztrálatlan kötés-konfigurációk, mint a Mattis-spinüvegben.

A II. fejezethez

1. Wannier G. H., *Phys. Rev.* 79, 357, 1950.
2. Utiyama T., *Prog. Theor. Phys.* 6, 907, 1951.
3. Phani M. K., Lebowitz J. L., Kalos M. H., Tsai C. C., *Phys. Rev. Letters* 42, 577, 1979; *Phys. Rev. B* 21, 4027, 1979.
4. Villain J., *J. Phys. C* 10, 1717, 1977.
5. Toulouse G., *Commun. Phys.* 2, 115, 1977.
6. Vannimenus J., Toulouse G., *J. Phys. C* 10, L537.
7. Domb C., *Phase transitions and critical phenomena* 3, szerk. C. Domb, M. S. Green, Academic Press, 1974. 375. oldal.
8. André G., Bidaux R., Carton J.-P., Conte R., de Seze L., *J. Physique* 40, 479, 1979.
9. Pekalski A., *J. Phys. A* 13, L51, 1980.
10. Longa L., Oleś A. M., *J. Phys. A* 13, 1031, 1980.
11. Hoever P., Wolff W. F., Zittartz J., *Z. Phys. B* 41, 43, 1981.
12. Wolff W. F., Hoever P., Zittartz J., *Z. Phys. B* 42, 259, 1981.

13. Wolff W. F., Zittartz J., Z. Phys. B 44, 109, 1981.
14. Hoever P., Zittartz J., Z. Phys. B. 44, 129, 1981.
15. Hoever P., Doktori disszertáció, Universitat zu Köln, 1981.
16. Wolff W. F., Doktori disszertáció, Universitat zu Köln, 1981.
17. Southern B. W., Chui S. T., Forgács G., J. Phys. C 13, L827, 1980.
18. Forgács G., Phys. Rev. B 22, 4473, 1980.
19. Peschel I., Z. Phys. B. 45, 339, 1982.
20. Wolff W. F., Zittartz J., Z. Phys. B 47, 341, 1982.
21. Hoever P., Z. Phys. B 48, 137, 1982.
22. Hoever P., Zittartz J., Z. Phys. B 49, 39, 1982.
23. Wolff W. F., Zittartz J., Z. Phys. B 49, 139, 1982.
24. Wolff W. F., Zittartz J., Z. Phys. B 49, 229, 1982.
25. Williams J. K., J. Phys. C 15, 263, 1982.
26. Williams J. K., J. Phys. C 15, 275, 1982.
27. Stephenson J., J. Math. Phys. 5, 1009, 1964.
28. Binder K., Z. Phys. B 45, 61, 1981.
29. Wegner F., J. Math. Phys. 12, 2259, 1971.
30. Selke W., Fisher M. E., Phys. Rev. B 20, 257, 1979.
31. Fisher M. E., Selke W., Phys. Rev. Letters 45, 1502, 1980.
32. Fisher M. E., Selke W., Phil. Trans. Roy. Soc. 302, 1, 1981.
33. Pokrovsky V. L., Uimin G., J. Phys. C 15, L353, 1982.
34. Pokrovsky V. L., Uimin G., ZhETF 82, 1640, 1982.
35. Kroemer J., Pesch W., J. Phys. A 15, L25, 1982.
36. Horiguchi T., Morita T., J. Phys. A 15, L75, 3551, 1982.
37. Roepstorff G., J. Math. Phys. 22, 3002, 1981.
38. Kirkpatrick S., Phys. Rev. B 16, 4630, 1977.
39. Barahona F., Maynard R., Rammal R., Uhry J. P., J. Phys. A 15, 673, 1982.
40. Morgenstern I., Horner H., Phys. Rev. B 25, 504, 1982.
41. Barahona F., J. Phys. A 15, 3241, 1982.
42. Barahona F., Maccioni E., J. Phys. A 15, L611, 1982.
43. Morgenstern I., Binder K., Hornreich R. M., Phys. Rev. B 23, 287, 1981.
44. Berker A. N., Kadanoff L. P., J. Phys. A 13, 263, 1980.
45. Nightingale M. P., Schick M., J. Phys. A 15, L39, 1982.
46. Temesvári T., J. Phys. A 15, L625, 1982.
47. Villain J., J. Phys. C 10, 4793, 1977.
48. Villain J., J. Phys. C 10, 11, 745, 1978.
49. Fradkin E., Huberman B. A., Shenker S. H., Phys. Rev. B 18, 4789, 1978.
50. Shastry B. S., J. Phys. C 15, 931, 1982.
51. Kosterlitz J. M., Thouless D. J., J. Phys. C 6, 1181, 1973.
52. Anderson P. W., Halperin B. I., Warma C. M., Phil. Mag. 25, 1, 1972.
53. Dzyaloshinskii I. E.: *Modern Trends in the Theory of Condensed Matter* (Lecture Notes in Physics), szerk. J. Ehlers, Springer Verlag, 1980. 115, 204.
54. Dzyaloshinskii I. E., Volovik G. E., J. Physique 39, 693, 1978.
55. Fazekas P., J. Phys. C 13, L209, 1980.
56. Fazekas P., Anderson P. W., Phil. Mag. 30, 423, 1974.
57. Sütő A., Fazekas P., Phil. Mag. 35, 623, 1977.
58. Fazekas P.: *Antiferromágnesség és szimmetriasértés. A szilárdtestkutatás újabb eredményei 4.* szerk. Siklós Tivadar, Akadémiai Kiadó, 1978.
59. Jullien R., Penson K. A., Pfeuty P., Uzelac K., Phys. Rev. Letters 44, 1551, 1980.
60. Penson K. A., Jullien R., Pfeuty P., Phys. Rev. B 25, 1837, 1982.
61. Danielian A., Phys. Rev. Letters 6, 670, 1961; Phys. Rev. 133A, 1344, 1964.

A III. fejezethez

1. Griffiths R. B., a *Statistical Mechanics and Quantum Field Theory*, Les Houches (Gordon and Breach, 1970) c. könyvben
2. Peierls R., Proc. Cambridge Phil. Soc. 32, 477, 1936.
Griffiths R. B., *Phae Transitions and Critical Phenomena I.* szerk. C. Domb, M. S. Green (Academic Press, 1972) 59. old.
3. Pirogov S. A., Sinai Ya. G., Teor. Mat. Fiz. 25, 358, 1975; 26, 61 1976.

4. Malyshev V. A., Comm. Math. Phys. 40, 75, 1975;
Fröhlich J., Lieb E. H., Comm. Math. Phys. 60, 233, 1978.
5. Mermin N. D., Wagner H., Phys. Rev. Letters 17, 1133, 1966.
6. Fröhlich J., Simon B., Spencer T., Comm. Math. Phys. 50, 79, 1976.
7. Montroll E. W., Potts R. B., Ward J. C., J. Math. Phys. 4, 308, 1963.
8. lásd például Gihman I. I., Szkorohod A. V.: *Bevezetés a sztochasztikus folyamatok elméletébe*. Műszaki Könyvkiadó, 1975. 125. oldal.

A IV. fejezethez

1. Dobrushin R. L., Funk. Anal. Pril. 2, 44, 1968.
2. Gruber Ch., J. Stat. Phys. 14, 81, 1976.
3. Onsager L., Phys. Rev. 65, 117, 1944.
4. Yang C. N., Lee T. D., Phys. Rev. 87, 404, 410, 1952.
5. Lebowitz J. L., Penrose O., Comm. Math. Phys. 11, 99, 1968.
6. Griffiths R. B., *Phase transitions and critical phenomena 1.*, szerk. C. Domb, M. S. Green (Academic Press, 1972) 54. oldal.
7. Asano T., J. Phys. Soc. Japan 29, 350, 1970.
8. Ruelle D., Phys. Rev. Letters 26, 303, 1971.
9. Ruelle D., Comm. Math. Phys. 31, 265, 1973.
10. Sarbach S., Rys F., Phys. Rev. B7, 3141, 1973.
11. Gruber Ch., Hintermann A., Merlini D., Comm. Math. Phys. 40, 83, 1975.
12. Syozi I., *Phase transitions and critical phenomena 1.*, szerk. C. Domb, M. S. Green, (Academic Press, 1972) 280. oldal.
13. Ruelle D.: *Statistical Mechanics: Rigorous Results*, Benjamin, New York, 1969.
14. Titchmarsh E. C.: *The theory of functions*. Oxford University Press, 1975. 168. oldal.

GLUON-KONDENZÁCIÓ KVARK-GLUON PLAZMÁBAN

LOVAS I.^{*}, GREINER W.

J. W. Goethe Egyetem Elméleti Fizikai Intézete, NSZK

HRASKÓ P., LOVAS E.

Központi Fizikai Kutató Intézet

SAILER K.

Kossuth Lajos Tudományegyetem, Kísérleti Fizikai Tanszék, Debrecen

Megmutatjuk, hogy a kvantumszíndinamika téregyenleteinek vannak a lokális színszimmetriát sértő átlagtérmegoldásai, amelyek sztatikus, transzverzális és periodikus kromomágneses teret írnak le. A kvantumszíndinamika téregyenleteiből átlagtérközelítésben levezethető szelf-konzisztens egyenletek ekvivalensek a kvark-gluon plazma termodinamikai egyensúlyának szükséges feltételeivel. A gluon-kondenzált rendszer termodinamikai potenciálja és egy barionra jutó kötési energiája adott hőmérséklet és a barionok adott kémiai potenciálja esetén kisebb mint a kölcsönhatásmentes Fermi-gázra vonatkozó megfelelő mennyiségek.

1. BEVEZETÉS

A gluon-kondenzációt eddig abból a feltevésből kiindulva vizsgálták, hogy bizonyos, színindexet nem hordozó mennyiségek várható értéke nem zérus [1, 2]. Mi most megmutatjuk, hogy a kvantumszíndinamika téregyenleteinek vannak a lokális színszimmetriát sértő átlagtér-megoldásai, amikor a gluontér várható értéke nem zérus, $\langle A^{\mu a} \rangle \neq 0$. Az ilyen megoldások a Lorentz-invarianciát is sértik, ami azzal kapcsolatos, hogy a kvark-gluon plazma kitünteti azt a vonatkoztatási rendszert, amelyben nyugalomban van. A normál kvark-gluon plazmának megfelelő $\langle A^{\mu a} \rangle = 0$ átlagtér-megoldás kölcsönhatásmentes fermion-rendszert ír le. Adott hőmérséklet és a barionok adott kémiai potenciálja esetén az a fázis valósul meg, amelyekben a rendszer termodinamikai potenciáljának sűrűsége kisebb. Ezért össze fogjuk hasonlítani a termodinamikai potenciálnak a kondenzált és a normál fázisra vonatkozó megfelelő értékeit.

2. ÁTLAGTÉR-KÖZELÍTÉS

A kvantumszíndinamika Lagrange-sűrűsége

$$\mathcal{L}(\psi, \bar{\psi}, A_{\mu}^a) = \frac{i}{2} \{ \bar{\psi} \gamma^{\nu} \partial_{\nu} \psi - \partial_{\nu} \bar{\psi} \gamma^{\nu} \psi \} - g \bar{\psi} \gamma^{\nu} A_{\nu}^c T^c \psi - \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^c F^{\mu\nu c} - m \bar{\psi} \psi, \quad (2.1)$$

ahol ψ a kvarktér, A_{μ}^a a gluontér, T^c az Ω mértékcsoporthoz tartozó lokális mértéktranszformációkkal szemben a (2.1) Lagrange-sűrűség invariáns;

* Állandó cím: Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest.

Érkezett 1984. nov. 4.

m a kvarktömeg és g a kvark-gluon csatolási állandó. Az $F^{\mu\nu a}$ térerősségtenzort az

$$F^{\mu\nu a} = \partial^\nu A^{\mu a} - \partial^\mu A^{\nu a} + gf_{abc} A^{\mu b} A^{\nu c} \quad (2.2)$$

összefüggés definiálja; f_{abc} az Ω mértékcsoport szerkezeti állandói. A (2.1) Lagrange-sűrűséghez tartozó Euler—Lagrange-egyenletek az alábbi mozgásegyenletekre vezetnek:

$$\partial_\nu F^{\nu\mu a} - gf_{abc} A_\nu^b F^{\nu\mu c} = -j^{\mu a}, \quad (2.3)$$

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - g\gamma^\mu T^a A_\mu^a - m)\psi = 0, \quad (2.4)$$

ahol

$$j^{\mu a} = g\bar{\psi}\gamma^\mu T^a \psi \quad (2.5)$$

a kvarkok vektoráramsűrűsége. A kvarkok és a gluonok teljes színáramsűrűsége:

$$J^{\mu a} = j^{\mu a} + gf_{abc} A_\nu^b F^{\mu\nu c}. \quad (2.6)$$

Az alábbiakban az $\Omega \equiv SU(2)$ mértékcsoport esetét fogjuk vizsgálni. Ekkor

$$f_{abc} = \varepsilon_{abc} \text{ és } T^a = \frac{1}{2}\tau^a (a, b, c = 1, 2, 3), \quad (2.7)$$

ahol ε_{abc} a teljesen antiszimmetrikus harmadrendű tenzor, τ^a pedig a Pauli-mátrixokat jelöli.

A kvark-gluon plazma kondenzált fázisát leíró olyan megoldást keresünk, amikor a gluontér várható értéke nem zérus, azaz

$$\langle A_\mu^a(x) \rangle = \bar{A}_\mu^a(x) \neq 0. \quad (2.8)$$

Megmutatjuk, hogy a (2.3) és (2.4) egyenleteknek létezik átlagtér-közelítésben (2.8) tulajdonságú megoldása, A (2.8) tulajdonságú átlagtér-megoldás sérti a lokális mértékinvarianciát. A szimmetriasértést nyilvánvalóvá tehetjük az

$$A_\mu^a(x) = \bar{A}_\mu^a(x) + \alpha_\mu^a(x) \quad (2.9)$$

felbontással, ahol definíció szerint

$$\langle \alpha_\mu^a(x) \rangle = 0. \quad (2.10)$$

Helyettesítsük be a (2.9) felbontást a (2.3) és (2.4) mozgásegyenletekbe:

$$\begin{aligned} & \partial_\nu \bar{F}^{\nu\mu a} - gf_{abc} \bar{A}_\nu^b \bar{F}^{\nu\mu c} + gf_{abc} \partial_\nu (\bar{A}^{\nu b} \alpha^{\mu c} + \bar{A}^{\mu b} \alpha^{\nu c}) - \\ & - gf_{abc} (\alpha_\nu^b \bar{F}^{\nu\mu c} + \bar{A}_\nu^b (\partial^\mu \alpha^{\nu c} - \partial^\nu \alpha^{\mu c} + gf_{cde} \bar{A}^{\nu d} \alpha^{\mu e} + gf_{cde} \alpha^{\nu d} \bar{A}^{\mu e})) - \\ & - gf_{abc} (\alpha_\nu^b gf_{cde} (\bar{A}^{\nu d} \alpha^{\mu e} + \alpha^{\nu d} \bar{A}^{\mu e}) + \bar{A}_\nu^b gf_{cde} \alpha^{\nu d} \alpha^{\mu e}) + \\ & + \partial_\nu f^{\nu\mu a} - gf_{abc} \alpha_\nu^b f^{\nu\mu c} = -j^{\mu a}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$[i\gamma^\mu \partial_\mu - g\gamma^\mu T^a (\bar{A}_\mu^a + \alpha_\mu^a) - m]\psi = 0, \quad (2.12)$$

ahol

$$f^{\mu\nu a} = \partial^\nu \alpha^{\mu a} - \partial^\mu \alpha^{\nu a} + gf_{abc} \alpha^{\mu b} \alpha^{\nu c}. \quad (2.13)$$

Helyettesítsük a (2.11) és a (2.12) egyenletekben $\alpha^{\mu c}$ kifejezéseit és a $j^{\mu a}$ vektoráramsűrűséget várható értékükkel. Tegyük fel, hogy az $\alpha^{\mu a}$ deriváltjait tartalmazó kifeje-

zések várható értéke zérus és csak az $(\alpha^{\mu a})^2$ tiszta négyzetes kifejezések várható értéke különbözik zérustól, mert a szorzatok tényezői egymástól függetlenül fluktuálnak, ha nem azonosak. Ekkor az alábbi átlagtér-egyenletekhez jutunk:

$$\partial_\nu \bar{F}^{\nu\mu a} - g f_{abc} \bar{A}_\nu \bar{F}^{\nu\mu c} - M_{(\mu a)}^2 \bar{A}^{\mu a} = -\langle j^{\mu a} \rangle, \quad (2.14)$$

$$[i\gamma^\mu \partial_\mu - g\gamma^\mu T^a \bar{A}_\mu^a - m]\psi = 0. \quad (2.15)$$

Itt bevezettük az

$$M_{(0a)}^2 \equiv g^2 \sum_{\beta=1}^3 \left(\sum_{b=1}^3 \langle \alpha^{\beta b} \alpha^{\beta b} \rangle - \langle \alpha^{\beta a} \alpha^{\beta a} \rangle \right),$$

$$M_{(\beta a)}^2 \equiv M_{(0a)}^2 + g^2 \langle \alpha^{0a} \alpha^{0a} - \sum_{b=1}^3 \alpha^{0b} \alpha^{0b} + \alpha^{\beta a} \alpha^{\beta a} - \sum_{b=1}^3 \alpha^{\beta a} \alpha^{\beta b} \rangle \quad (2.16)$$

paramétereket, amelyek a gluon-átlagtér „tömegét” jelentik. E paraméterek értéke függ a rendszer állapotától. A bevezetett átlagtér-közelítésben a g csatolási állandót is alkalmas effektív értékkel kell helyettesíteni.

A (2.1) Lagrange-sűrűségből leszámaztathatjuk az energiaimpulzus-tenzort is:

$$\begin{aligned} T^{\mu\nu} &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} \partial^\nu \psi + \partial^\nu \bar{\psi} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \bar{\psi})} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu A_\delta^a)} \partial^\nu A_\delta^a - g^{\mu\nu} \mathcal{L} = \\ &= \frac{i}{2} (\bar{\psi} \gamma^\mu \partial^\nu \psi - \partial^\nu \bar{\psi} \gamma^\mu \psi) + F^{\mu\delta a} \partial^\nu A_\delta^a - g^{\mu\nu} \mathcal{L}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Átlagtér-közelítésben

$$T_{MF}^{\mu\nu} = \frac{i}{2} (\bar{\psi} \gamma^\mu \partial^\nu \psi - \partial^\nu \bar{\psi} \gamma^\mu \psi) + \bar{F}^{\mu\delta a} \partial^\nu \bar{A}_\delta^a - g^{\mu\nu} \mathcal{L}_{MF}, \quad (2.18)$$

ahol

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{MF} &= \mathcal{L}(\psi, \bar{\psi}, \bar{A}_\mu^a) + \frac{1}{2} \sum_{\mu a} M_{(\mu a)}^2 \bar{A}_\mu^a \bar{A}^{\mu a} = \\ &= -\frac{i}{2} (\bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\mu \psi + \bar{\psi} \tilde{\partial}_\mu \gamma^\mu \psi) - \frac{1}{4} \bar{F}_{\mu\nu}^c \bar{F}^{\mu\nu c} + \frac{1}{2} \sum_{\mu a} M_{(\mu a)}^2 \bar{A}_\mu^a \bar{A}^{\mu a}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

A (2.19) Lagrange-sűrűséget kiegészítettük a (2.14) egyenlettel összhangban egy tömegtaggal és felhasználtuk a (2.15) Dirac-egyenletet.

3. MEGOLDÁSOK ÁTLAGTÉR-KÖZELÍTÉSSEN

A (2.14) és a (2.15) egyenleteknek az $\bar{A}^{\mu a} \equiv 0$ triviális megoldása, amely a normálfázisú kvark-gluon plazmát írja le.

A kvark-gluon plazma gluon-konzentált fázisát leíró megoldásokat

$$\bar{A}^{\mu a}(x) = a^\mu \theta^a(kx)/g \quad (3.1)$$

alakban keressük, ahol $kx = k^0 x^0 - \vec{k} \vec{x}$ és

$$\theta^1(kx) = \cos(kx), \quad \theta^2(kx) = \sin(kx), \quad \theta^3(kx) = 0. \quad (3.2)$$

A (3.1) feltevést a (2.15) és (2.16) téregyenletekbe behelyettesítve az alábbi egyenleteket kapjuk:

$$i\gamma^\nu \partial_\nu \psi - \frac{1}{2} \gamma^\nu a_\nu \theta^c \tau^c \psi - m\psi = 0, \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} -g \left\langle \frac{1}{2} g \bar{\psi} \gamma^\mu \tau^a \psi \right\rangle - \varepsilon_{abc} \theta^b \theta^c a_\delta (k^\delta a^\mu - k^\mu a^\delta) = \\ = k_\delta (k^\delta a^\mu - k^\mu a^\delta) \theta^a - M_{(\mu a)}^2 a^\mu \theta^a. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Itt $\theta^{a'}(x) = \frac{d}{d\alpha} \theta^a(x)$. A (3.3) és (3.4) szelf-konzisztens egyenletekben $M_{(\mu 3)}^2$ nem lép fel, mert $\theta^{a=3}=0$. A továbbiakban feltételezzük, hogy $M_{(\mu 1)}^2 = M_{(\mu 2)}^2 \equiv M_{(\mu)}^2$, mert a (3.4) szelf-konzisztens egyenleteknek ekkor és csak ekkor lehet (3.1)–(3.2) alakú megoldása.

Térjünk át a

$$\psi \rightarrow \psi_v \equiv R^+ \psi, \quad R \equiv \exp \left\{ -\frac{i}{2} kx \tau_3 \right\} \quad (3.5)$$

transzformációval a ψ_v kvázikvark-térre. A kvázikvarkokra vonatkozó Dirac-egyenlet „potenciálja” nem függ a téridő-koordinátáktól, s így az egyenletnek vannak síkhullámú megoldásai.

Felhasználva, hogy

$$\bar{\psi} \tau^a \psi = \begin{cases} \bar{\psi}_v (\tau^1 \cos kx - \tau^2 \sin kx) \psi_v, & \text{ha } a = 1 \\ \bar{\psi}_v (\tau^2 \cos kx + \tau^1 \sin kx) \psi_v, & \text{ha } a = 2 \\ \bar{\psi}_v \tau^3 \psi_v, & \text{ha } a = 3 \end{cases} \quad (3.6)$$

$$\partial_\nu \psi = R \partial_\nu \psi_v - \frac{i}{2} k_\nu \tau^3 R \psi_v, \quad (3.7)$$

és

$$R^+ \tau^c R \theta^c = \tau^1, \quad (3.8)$$

a (3.3) és a (3.4) egyenletek az alábbi alakba írhatók:

$$\left[i\gamma^\mu \partial_\mu + \frac{1}{2} \gamma^\mu B_\mu^a \tau^a - m \right] \psi_v = 0, \quad (3.9)$$

$$-g \left\langle \frac{1}{2} g \bar{\psi}_v \gamma^\mu \tau^1 \psi_v \right\rangle = k_\delta (k^\delta a^\mu - k^\mu a^\delta) - M_{(\mu)}^2 a^\mu, \quad (3.10)$$

$$\left\langle \frac{1}{2} g \bar{\psi}_v \gamma^\mu \tau^2 \psi_v \right\rangle = 0, \quad (3.11)$$

$$-g \left\langle \frac{1}{2} g \bar{\psi}_v \gamma^\mu \tau^3 \psi_v \right\rangle = a_\delta (k^\delta a^\mu - k^\mu a^\delta), \quad (3.12)$$

ahol

$$B_\mu^{a=1} = a_\mu, \quad B_\mu^{a=2} = 0, \quad B_\mu^{a=3} = k_\mu. \quad (3.13)$$

A (3.9) egyenlet síkhullámú megoldásaihoz tartozó energiasajátértékek szolgáltatják a kvázikvarkok és antirészecskéik energiaspektrumát, amelynek ismeretében a (3.10)—(3.12) egyenletek bal oldalán álló vektoráramsűrűségek kifejezhetők mint a^μ és k^μ függvényei. A (3.10)—(3.12) szelf-konzisztens egyenletrendszer szolgál az a^μ és k^μ paraméterek meghatározására.

A (3.9) Dirac-egyenlet

$$\psi_v = U e^{ipx} \quad (3.14)$$

alakú síkhullám-megoldásait az

$$\left(\gamma^\mu p_\mu + \frac{1}{2} \gamma^\mu B_\mu^a \tau^a - m \right) U = 0 \quad (3.15)$$

sajátérték-feladat megoldása adja. Legyen

$$P_\mu \equiv p_\mu + \frac{1}{2} B_\mu^a \tau^a \quad (3.16)$$

és vezessük be a χ spinort az

$$U \equiv \frac{1}{m} (P_\mu \gamma^\mu + m) \chi \quad (3.17)$$

definícióval. Ekkor a (3.15) egyenletből

$$\begin{aligned} (P_\mu \gamma^\mu - m)(P_\mu \gamma^\mu + m) \chi &= \\ &= (P_\mu P^\mu + \frac{1}{4} \varepsilon_{abc} \sigma^{\mu\nu} B_\mu^a B_\nu^b \tau^c - m^2) \chi = 0 \end{aligned} \quad (3.18)$$

adódik. Felhasználva, hogy

$$\sigma^{0\alpha} = i \begin{pmatrix} 0 & \sigma^\alpha \\ \sigma^\alpha & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^{\alpha\beta} = \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \begin{pmatrix} \sigma^\gamma & 0 \\ 0 & \sigma^\gamma \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

a (3.18) egyenlet a

$$\begin{pmatrix} C & D \\ D & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = 0, \quad \chi = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

alakot ölti. Itt bevezettük a

$$C = p_\mu p^\mu + \frac{1}{4} B_\mu^a B^{\mu a} - m^2 + p^\mu B_\mu^a \tau^a + \frac{1}{2} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} B_\alpha^3 B_\beta^1 \sigma^\gamma, \quad (3.21)$$

és a

$$D = \frac{1}{2} i (B_0^3 B_\gamma^1 - B_\gamma^3 B_0^1) \sigma^\gamma \quad (3.22)$$

jelölést. A (3.20) egyenlet mátrixának szimmetriáját felhasználva, a megoldást kereshetjük γ_5 sajátfüggvényeként $u_1 = u_2 \equiv u$ alakban. Ekkor azt kapjuk, hogy

$$(C + D) u = 0, \quad (3.23)$$

azaz

$$(R^2 + \tilde{s} \tilde{\tau}) u = 0, \quad (3.24)$$

ahol

$$\begin{aligned}
 R^2 &= p_\mu p^\mu + \frac{1}{4} B_\mu^a B^{\mu a} - m^2, \\
 s^1 &= p^\mu B_\mu^1, \quad s^3 = p^\mu B_\mu^3, \\
 s^2 &= \left(\frac{1}{2} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} B_\alpha^3 B_\beta^1 + i B_0^3 B_\gamma^1 \right) \sigma^\gamma.
 \end{aligned} \tag{3.25}$$

Mivel $[s^a, s^b] = 0$, a (3.24) egyenlet diagonalizálható, ha balról beszorzunk $(R^2 - \vec{s}\vec{\tau})$ -val. Az energiasajátértékeket az

$$R^4 - \vec{s}^2 = 0 \tag{3.26}$$

egyenletből kapjuk.

A (3.25) kifejezések behelyettesítése és azonos algebrai átalakítások után a (3.26) egyenlet

$$p_0^4 + b p_0^2 + c p_0 + d = 0 \tag{3.27}$$

alakot ölt, ahol

$$\begin{aligned}
 b &= -2 \left[\vec{p}^2 + m^2 + \frac{1}{4} (a_0^2 + \vec{a}^2) + \frac{1}{4} (k_0^2 + \vec{k}^2) \right], \\
 c &= 2[a^0(\vec{p}\vec{a}) + k^0(\vec{p}\vec{k})], \\
 d &= \left[\vec{p}^2 + m^2 + \frac{1}{4} (\vec{a}^2 - a_0^2) + \frac{1}{4} (\vec{k}^2 - k_0^2) \right]^2 - (\vec{p}\vec{a})^2 - (\vec{p}\vec{k})^2 - \\
 &\quad - \frac{1}{4} (k_0^2 \vec{a}^2 + a_0^2 \vec{k}^2 + \vec{k}^2 \vec{a}^2 - (\vec{k}\vec{a})^2 - 2a_0 k_0 \vec{a}\vec{k}).
 \end{aligned} \tag{3.28}$$

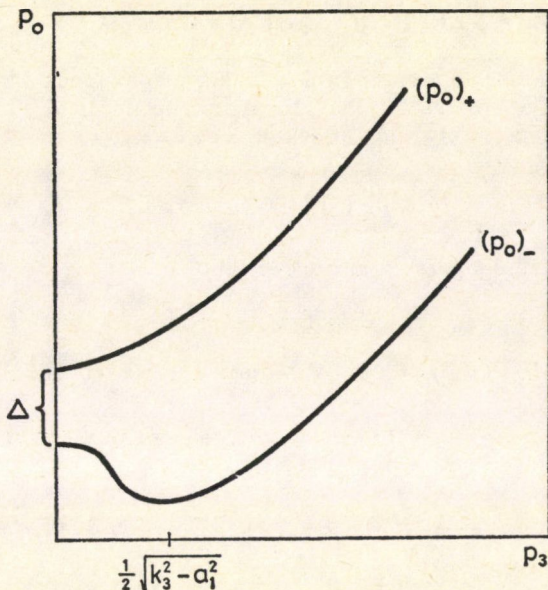
Látjuk, hogy a fermion-energianívók kétszeresen elfajultak.

Ha $a_0 = a_2 = a_3 = 0$ és $k_0 = k_1 = k_2 = 0$, akkor $c = 0$ miatt a (3.27) egyenlet p_0^2 -ben másodfokú. Az energiasajátértékek

$$(p_0^2)_\pm = m^2 + \vec{p}^2 + \frac{1}{4} (a_1^2 + k_3^2) \pm \sqrt{(p_1 a_1)^2 + (p_3 k_3)^2 + \frac{1}{4} (k_3 a_1)^2}.$$

Vegyük észre, hogy a $\sqrt{(p_0^2)_-}$ sajátérték p_3 függvényében a $p_3 \neq 0$ helyen rendelkezhet minimummal (1. ábra). A pion-kondenzáció esetében láttuk [3], hogy az egyrészcseke-energasajátértékeknek ez a viselkedése lehetővé teszi, hogy a normálállapotban ($a_1 = k_3 = 0$) izotróp impulzuseloszlású fermionok átrendeződjenek az impulzustérben, és az energetikailag kedvezőbb anizotróp impulzuseloszlást vegyék fel, ami a kondenzált fázist jellemzi.

Végezzük el a (3.5) transzformációt az energia-impulzus-tenzor (2.17) kifejezésben, és helyettesítsük be a (3.1) feltevést, ekkor a (3.12) egyenlet felhasználásával az



1. ábra. Fermion-energiasajátértékek $p_1 = p_2 = 0$ és $|k_3| \geq |a_1|$, $a_0 = a_2 = a_3 = k_0 = k_1 = k_2 = 0$ esetén ($\Delta = \sqrt{m^2 + (k_3 + a_1)^2/4} - \sqrt{m^2 + (k_3 - a_1)^2/4}$).

alábbi kifejezés adódik:

$$\begin{aligned}
 \langle T_{MF}^{\mu\nu} \rangle &= \left\langle \frac{i}{2} (\bar{\psi}_\nu \gamma^\mu \partial^\nu \psi_\nu - \partial^\nu \bar{\psi}_\nu \gamma^\mu \psi_\nu) \right\rangle + \frac{1}{2} \langle \bar{\psi}_\nu \gamma^\mu \tau^3 \psi_\nu \rangle k^\nu + \bar{F}^{\mu\sigma a} \partial^\nu \bar{A}_\sigma^a + g^{\mu\nu} \varepsilon = \\
 &= \left\langle \frac{i}{2} (\bar{\psi}_\nu \gamma^\mu \partial^\nu \psi_\nu - \partial^\nu \bar{\psi}_\nu \gamma^\mu \psi_\nu) \right\rangle - a_\sigma (k^\sigma a^\mu - k^\mu a^\sigma) k^\nu / g^2 \\
 &\quad + (k^\sigma a^\mu - k^\mu a^\sigma) k^\nu a_\sigma / g^2 + g^{\mu\nu} \varepsilon = \\
 &= \left\langle \frac{i}{2} (\bar{\psi}_\nu \gamma^\mu \partial^\nu \psi_\nu - \partial^\nu \bar{\psi}_\nu \gamma^\mu \psi_\nu) \right\rangle + g^{\mu\nu} \varepsilon,
 \end{aligned} \tag{3.29}$$

ahol

$$\begin{aligned}
 \varepsilon = -\langle \mathcal{L}_{MF} \rangle &= \frac{1}{2g^2} \left\{ \sum_{a=1}^3 (M_{(a)}^2 + \vec{k}^2 - k_0^2) a_a^2 - (M_{(0)}^2 + \vec{k}^2) a_0^2 - \right. \\
 &\quad \left. - (\vec{a}\vec{k})^2 + 2a^0 k^0 (\vec{a}\vec{k}) \right\}.
 \end{aligned} \tag{3.30}$$

4. A TERMODINAMIKAI EGYENSÚLY

Az eddigiekben még nem rögzítettük a fizikai mennyiségek várható értékei meghatározásának módját. Mivel adott μ kémiai potenciálú és T hőmérsékletű kvark-gluon plazma viselkedését kívánjuk vizsgálni, a rendszert a

$$\varrho = \frac{1}{Z} \exp\{-(H - \mu N)/T\} \quad (4.1)$$

makrokanonikus sűrűségoperátorral írjuk le, ahol

$$Z = \text{Tr } e^{-(H - \mu N)/T} \quad (4.2)$$

az állapotösszeg, $H = \int T_{MF}^{00} dV$ és N rendre a rendszer Hamilton-operátora és barionszám-operátora.

A ψ_v kvázikvark-tér kifejezhető pozitív energiájú $U_\lambda(\vec{p})e^{-ipx}$ és negatív energiájú $V_\lambda(\vec{p})e^{ipx}$ síkhullámmegoldások teljes rendszere szerint

$$\begin{aligned} \psi_v(x) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}\lambda} (b_\lambda(\vec{p}) U_\lambda(\vec{p}) e^{-ipx} + d_\lambda^\dagger(\vec{p}) V_\lambda(\vec{p}) e^{ipx}), \\ \psi_v^\dagger(x) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}\lambda} (b_\lambda^\dagger(\vec{p}) U_\lambda^\dagger(\vec{p}) e^{ipx} + d_\lambda(\vec{p}) V_\lambda^\dagger(\vec{p}) e^{-ipx}), \end{aligned} \quad (4.3)$$

ahol az $U_\lambda(\vec{p})$ és $V_\lambda(\vec{p})$ spinorok a (3.15) összefüggés értelmében a

$$\begin{aligned} p_0 U_\lambda(\vec{p}) &\equiv E_\lambda^{(+)}(\vec{p}) U_\lambda(\vec{p}) = (\gamma^0 \vec{\gamma} \vec{p} - \frac{1}{2} \gamma^0 \gamma^\mu B_\mu^a \tau^a + m \gamma^0) U_\lambda(\vec{p}) \equiv \\ &\equiv H_D(\vec{p}) U_\lambda(\vec{p}), \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$p_0 V_\lambda(\vec{p}) \equiv -E_\lambda^{(-)}(-\vec{p}) V_\lambda(\vec{p}) \equiv \bar{E}_\lambda^{(+)}(\vec{p}) V_\lambda(\vec{p}) \equiv -H_D(-\vec{p}) V_\lambda(\vec{p}) \quad (4.5)$$

egyenletek megoldásai, $E_\lambda^{(+)}(\vec{p})$ és $\bar{E}_\lambda^{(+)}(\vec{p})$ a kvázikvarkok és antirészecskéik energia-sajátértékei. A λ index a spin- és színindexek $2 \times 2 = 4$ lehetséges kombinációját futja be.

Az átlagtér-közelítésben a gluonteret klasszikus térként kezeljük. Így csak a fermion-teret kvantáljuk a (4.3) kifejtés Fourier-amplitúdóira előírt szokásos antikommutátor-relációk segítségével. Ekkor $b_\lambda^\dagger(\vec{p})$ és $b_\lambda(\vec{p})$ ill. $d_\lambda^\dagger(\vec{p})$ és $d_\lambda(\vec{p})$ kvázikvark-ill. antikvázikvarkkeltő és eltüntető operátorokká válnak. Valamely \vec{O} fizikai mennyiség várható értékén az

$$\langle \vec{O} \rangle = \text{Tr} \{ \varrho : \vec{O} : \} \quad (4.6)$$

spurt értjük.

A Hamilton-operátor (3.29) alapján

$$H = \sum_{\vec{p}\lambda} (E_\lambda^{(+)}(\vec{p}) b_\lambda^\dagger(\vec{p}) b_\lambda(\vec{p}) + \bar{E}_\lambda^{(+)}(\vec{p}) d_\lambda^\dagger(\vec{p}) d_\lambda(\vec{p})) + \varepsilon V \quad (4.7)$$

alakú, a barionszám-operátor pedig

$$N = \int \psi^\dagger \psi dV = \sum_{\vec{p}\lambda} (b_\lambda^\dagger(\vec{p}) b_\lambda(\vec{p}) - d_\lambda^\dagger(\vec{p}) d_\lambda(\vec{p})). \quad (4.8)$$

A (4.8) és (4.9) összefüggések mutatják, hogy átlagtérközelítésben a kvark-gluon plazmát gluon-átlagtérben mozgó, egymással kölcsön nem ható kvázikvarkok és antikvázikvarkok rendszerének tekinthetjük.

Helyettesítsük a (4.7) és (4.8) kifejezéseket az állapotösszeg (4.2) definíciójába. A spurkzés elvégzése után

$$Z = \exp\left(-\frac{\varepsilon V}{T}\right) \prod_{\vec{p}\lambda} (1 + e^{-(E_{\lambda}^{(+)}(\vec{p}) - \mu)/T}) (1 + e^{-(E_{\lambda}^{(+)}(\vec{p}) + \mu)/T}) \quad (4.9)$$

adódik az állapotösszegre. A termodinamikai potenciál

$$\Omega = -T \ln Z = \varepsilon V - T \sum_{\vec{p}\lambda} \{ \ln(1 + e^{-(E_{\lambda}^{(+)}(\vec{p}) - \mu)/T}) + \ln(1 + e^{-(E_{\lambda}^{(+)}(\vec{p}) + \mu)/T}) \}. \quad (4.10)$$

A termodinamikai potenciál kémiai potenciál szerinti parciális deriváltja egyenlő a barionszámmal, s az utóbbira kapott kifejezésből leolvasható, hogy a kvázikvark- és antikvázikvark-állapotok betöltési valószínűségei:

$$\begin{aligned} n_{\lambda}(\vec{p}) &\equiv \langle b_{\lambda}^{+}(\vec{p}) b_{\lambda}(\vec{p}) \rangle = [1 + e^{(E_{\lambda}^{(+)}(\vec{p}) - \mu)/T}]^{-1}, \\ \bar{n}_{\lambda}(\vec{p}) &\equiv \langle d_{\lambda}^{+}(\vec{p}) d_{\lambda}(\vec{p}) \rangle = [1 + e^{(E_{\lambda}^{(+)}(\vec{p}) + \mu)/T}]^{-1}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

A Dirac- és a Pauli-mátrixokból valamint a ∂^{μ} differenciáloperátorból alkotott tetszőleges $\psi_v \Gamma(i\partial^{\mu}) \psi_v$ egyrészecske-operátor várható értéke [3, 4]:

$$\begin{aligned} \langle \bar{\psi}_v \Gamma(i\partial^{\mu}) \psi_v \rangle &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}\lambda} \{ \bar{U}_{\lambda}(\vec{p}) \Gamma(p^{\nu}) U_{\lambda}(\vec{p}) n_{\lambda}(\vec{p}) - \\ &\quad - \bar{V}_{\lambda}(\vec{p}) \Gamma(-p^{\nu}) V_{\lambda}(\vec{p}) \bar{n}_{\lambda}(\vec{p}) \}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

A számunkra fontos várható értékek a következők:

$$\langle \bar{\psi}_v \gamma^0 i\partial^0 \psi_v \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}\lambda} \{ E_{\lambda}^{(+)}(\vec{p}) n_{\lambda}(\vec{p}) + \bar{E}_{\lambda}^{(+)}(\vec{p}) \bar{n}_{\lambda}(\vec{p}) \}, \quad (4.13a)$$

$$\langle \bar{\psi}_v \gamma^0 i\partial^{\alpha} \psi_v \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}\lambda} \{ n_{\lambda}(\vec{p}) + \bar{n}_{\lambda}(\vec{p}) \} p^{\alpha}, \quad (4.13b)$$

$$\langle \bar{\psi}_v \gamma^{\alpha} i\partial^0 \psi_v \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}\lambda} \left\{ \frac{\partial E_{\lambda}^{(+)}}{\partial p^{\alpha}} E_{\lambda}^{(+)}(\vec{p}) n_{\lambda}(\vec{p}) + \frac{\partial \bar{E}_{\lambda}^{(+)}}{\partial p^{\alpha}} \bar{E}_{\lambda}^{(+)}(\vec{p}) \bar{n}_{\lambda}(\vec{p}) \right\}, \quad (4.13c)$$

$$\langle \bar{\psi}_v \gamma^{\alpha} i\partial^{\beta} \psi_v \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}\lambda} \left\{ \frac{\partial E_{\lambda}^{(+)}}{\partial p^{\alpha}} n_{\lambda}(\vec{p}) + \frac{\partial \bar{E}_{\lambda}^{(+)}}{\partial p^{\alpha}} \bar{n}_{\lambda}(\vec{p}) \right\} p^{\beta}, \quad (4.13d)$$

$$\langle \bar{\psi}_v \gamma^0 \psi_v \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}\lambda} \{ n_{\lambda}(\vec{p}) - \bar{n}_{\lambda}(\vec{p}) \}, \quad (4.13e)$$

$$\left\langle \bar{\psi}_v \frac{1}{2} g^{\gamma\mu} \tau^a \psi_v \right\rangle = -\frac{1}{V} \sum_{\vec{p}\lambda} \left\{ \frac{\partial E_{\lambda}^{(+)}}{\partial B_{\mu}^a} n_{\lambda}(\vec{p}) + \frac{\partial \bar{E}_{\lambda}^{(+)}}{\partial B_{\mu}^a} \bar{n}_{\lambda}(\vec{p}) \right\} \quad (4.13f)$$

A rendszer termodinamikai potenciálja a μ kémiai potenciál, a T hőmérséklet és a B_μ^a paraméterek (a_μ és k_μ) függvénye. Adott μ és T esetén a rendszer termodinamikai egyensúlyának szükséges feltételei

$$\frac{\partial \Omega}{\partial B_\mu^a} = 0. \quad (4.14)$$

Helyettesítsük ezekbe az egyenlőségekbe a termodinamikai potenciál (4.10) kifejezését. A (4.13f) várható érték felhasználásával a (4.14) egyenletek

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial B_\mu^a} = \left\langle \bar{\psi}_v \frac{1}{2} g \gamma^\mu \tau^a \psi_v \right\rangle \quad (4.15)$$

alakot öltenek. Helyettesítsük be ezután ε (3.30) kifejezését a (4.15) egyenletekbe; az a^μ és k^μ szerinti deriválások elvégzése után visszakapjuk a (3.10)–(3.12) szelf-konzisztens egyenleteket.

Adott kémiai potenciál és hőmérséklet esetén tehát a kvark-gluon plazma termodinamikai egyensúlyának szükséges feltételei megegyeznek a téregyenletekből levezetett szelf-konzisztens egyenletekkel, amennyiben átlagtérközelítést alkalmazunk.

A fentiek lehetővé teszik, hogy a (3.10)–(3.12) egyenletek megoldása helyett a termodinamikai potenciál minimumának keresésével határozzuk meg az a^μ és k^μ paramétereknek a gluonkondenzált fázist jellemző értékeit adott T és μ esetén.

A normálfázisú kvark-gluon plazma termodinamikai potenciálja:

$$\Omega_0(\mu, T) \equiv \Omega(\mu, T, a^\mu = 0, k^\mu = 0). \quad (4.16)$$

Megjegyezzük még, hogy a teljes színáramsűrűség átlagtér-közelítésben a (2.15) egyenlet felhasználásával

$$\bar{J}^{\mu a} = \langle j^{\mu a} \rangle + g f_{abc} \bar{A}_v^b \bar{F}^{\mu \nu c} = -\partial_\nu \bar{F}^{\nu \mu a} + M_{(\mu a)}^2 \bar{A}^{\mu a}. \quad (4.17)$$

A teljes színáram akkor és csak akkor megmaradó, ha

$$\partial_\mu \bar{J}^{\mu a} = 0, \quad (4.18)$$

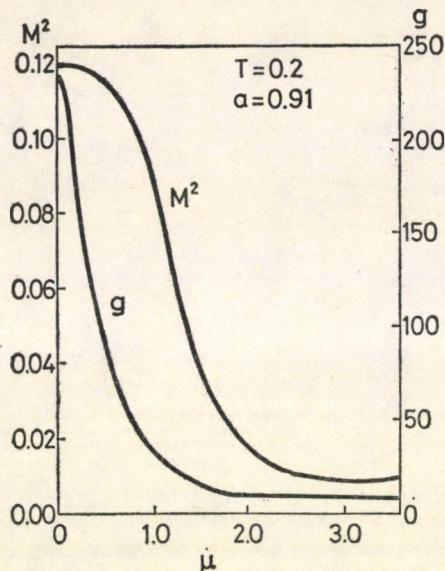
azaz ha

$$a^\mu k_\mu = 0. \quad (4.19)$$

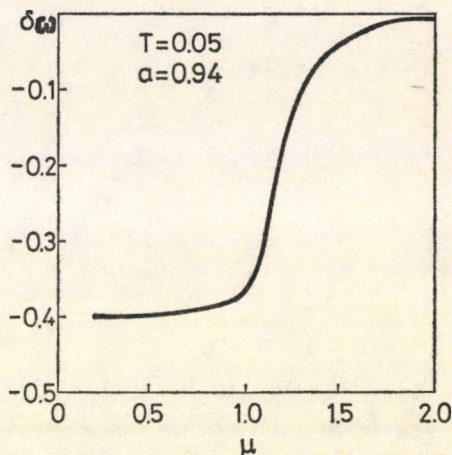
5. AZ ÁTLAGTÉR-MEGOLDÁSOK TULAJDONSÁGAI

A (3.10)–(3.12) szelf-konzisztens egyenleteknek találtunk $k_0 = k_1 = k_2 = 0$, $k_3 = 1.0$ és $a_2 = a_3 = a_0 = 0$, $a_1 \leq 1.0$ feltételeknek eleget tevő megoldásait a $0.05 \leq T \leq 10.0$ hőmérsékletintervallumban és a barionok kémiai potenciáljának $0.1 \leq \mu \leq 3.0$ értékei esetén. Ezek a megoldások sztatikus, transzverzális és periodikus kromomágneses teret írnak le, amely szelf-konzisztens módon hozza létre a fermionok egykristályra emlékeztető periodikus spin-színszerkezetét. A hossz-skálát a kvarktömeg reciproka definiálja; a számolások $m=1$ választással történtek. Ennek megfelelően T , μ , ω , q , a^μ , k^μ és M^2 rendre m , m , m^4 , m^3 , m , m és m^2 egységekben van mérve. A megoldások transzverzalizációja biztosítja, hogy a (4.19) egyenlőség teljesül, azaz a teljes színáram megmarad.

Miután az M^2 és g paraméterek nem ismeretesek, ezért a (3.10)–(3.12) szelf-konzisztens egyenleteket adott T , μ , a^μ és k^μ esetén megoldottuk M^2 -re és g -re. Csökkenő kémiai potenciál és/vagy hőmérséklet esetén az M^2 és g paraméterek értéke nő (2. ábra).



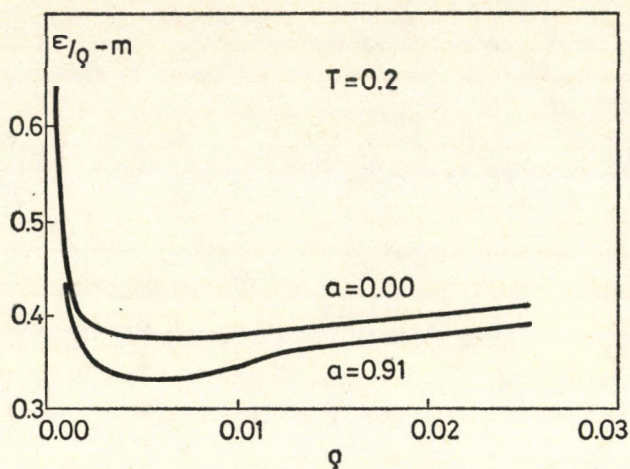
2. ábra. Az M^2 és g paraméterek a barionok kémiai potenciáljának függvényében



3. ábra. A kondenzált és a normál fázis termodinamikai potenciáljainak relatív eltérése, $\delta\omega \equiv \frac{\Omega(a_1 \neq 0) - \Omega(a_1 = 0)}{\Omega(a_1 = 0)}$ a barionok kémiai potenciáljának függvényében

Azt tapasztaltuk, hogy adott hőmérséklet és a barionok adott kémiai potenciálja esetén a gluon-kondenzált rendszer termodinamikai potenciálja lényegesen kisebb a normál rendszer termodinamikai potenciáljánál (3. ábra). Az eltérés a kondenzált és a normál fázis termodinamikai potenciáljának megfelelő értékei között növekvő hőmérséklettel és/vagy kémiai potenciállal csökken. A vizsgált hőmérséklet- és sűrűségtartományban nem találtunk fázisegyensúlyi állapotokat. Figyelemre méltó azonban, hogy a kémiai potenciál függvényében a kondenzált és a normál fázis termodinamikai potenciáljainak relatív eltérése lépcsőszerűen változik (akárcsak M^2): $\mu \ll m$ esetén a relatív eltérés közelítőleg állandó és $\mu \approx m$ közelében gyorsan csökken le zérushoz közeli értékre.

A kvark-gluon plazmában levő gluonok kondenzációja sok tekintetben hasonló a maganyagban levő pionok kondenzációjához. A kvark-gluon plazma kondenzált fázisában megsérül a lokális színszimmetria, a maganyag pionkondenzált fázisa a globális izospin-szimmetriát sérti. A kondenzáció létrejöttét a kvark-gluon kölcsönhatás elegendően erős volta teszi lehetővé, ami abban nyilvánul meg, hogy kondenzált fázisnak megfelelő megoldást csak elegendően nagy effektív csatolási állandó esetén találunk adott hőmérséklet és kémiai potenciál mellett. Hasonló a helyzet a pionkondenzáció esetében. A kondenzált fázisban mindkét esetben lehetségesek térben periodikus, sztatikus átlagtér-megoldások, és a fermionok a periodikus átlagtérben



4. ábra. Az egy bariontöltésre eső energia a barionsűrűség függvényében, gluonkondenzált rendszerre ($a \neq 0$) és kölcsönhatásmentes Fermi-gázra ($a = 0$)

kölcsönhatásmentesen mozgó kvázirészecskének tekinthetők. Az utóbbi tulajdonság annak köszönhető, hogy a fermionokra vonatkozó Dirac-egyenlet kölcsönhatást tartalmazó tagjában a spin- és szín- ill. a spin- és izospin-indexeket szétcsatolva, az egyenletnek vannak síkhullámú megoldásai. A fermionok egyrészecskespektruma mindkét esetben felhasad az átlagtérrel való kölcsönhatás miatt és az egyrészecskespektrum egyik ága rendelkezhet $\vec{p} \neq 0$ impulzus esetén minimummal. Ha az utóbbi helyzet áll elő, akkor lehetőség nyílik a fermionok olyan átrendeződésére az impulzustérben, ami a termodinamikai potenciál csökkenéséhez vezet.

Köszönetnyilvánítás

E munka során igen hasznos megbeszéléseket folytattunk V. N. Gribovval, B. Müllerrel, Huszár Miklóssal és Zimányi Józseffel. Ezuton fejezzük ki hálás köszönetünket.

IRODALOM

1. G. K. Savidy, Phys. Lett. 71B, 173, 1977.
2. J. Balog, A. Patkós, Phys. Lett. 98B, 205, 1981.
3. B. Banerjee, N. K. Glendenning, M. Gyulassy, Nucl. Phys. A461, 326, 1981.
4. Sailer K., Németh J., Lovas I., Magyar Fizikai Folyóirat 32, 1, 1984.
5. Lovas I., Németh J., Sailer K., Phys. Lett. 135B, 258, 1984.

KÖNYVISMERTETÉS

Non-Equilibrium Dynamic in Chemical Systems C. Vidal and A. Pacault
Springer Series in Synergetics 27

Nehéz helyzetben vagyunk, ha meg akarjuk határozni mi is az a szinergetika. A sorozatszerkesztő, H. Haken, magának a szinergetika szónak a szülőatyja úgy definiálja, mint olyan interdiszciplináris tudományt, amely a rendszerek alkotóinak térbeli, időbeli struktúrákra vezető együttműködését kutatja. A sorozat eddigi köteteinek sokfélesége alá is támasztja ezt a laza meghatározást. Külön kötetek foglalkoznak a szerkezeti stabilitás, a kritikus jelenségek, a kvantitatív szociológia, a rend és a káosz, a kémiai oszcillátorok, az agy szinergetikája, a hierarchikus rendszerek dinamikája, szociális rendszerek szerveződése és további, a kívülálló számára nem kevésbé távoleső kérdésekkel. Élve a tévedés jogával, megkockáztathatjuk azt a kijelentést, hogy ennek a valóban dinamikus fejlődő diszciplínának az igazi összetartó ereje az az új problémafelvetés és matematikai formalizmus, amelynek gyökereit a nemlineáris rendszerek tárgyalása, az irreverzibilis termodinamika, a katasztrófa elmélet vidékén kereshetjük.

1984 szeptemberében harmadszor rendezték meg Bordeauxban a francia CNRS támogatásával a nemlineáris kémiai rendszerek kutatásának seregszemléjét. A korábbi, 1978-ban, illetve 1981-ben tartott összejövetelekhez hasonlóan széles nemzetközi részvétel és aktivitás jellemezte a konferenciát. A tudományterület nyilvánvalóan felfelé ívelő periódusban van, amit az is jelez, hogy felvetődött az évenkénti tanácskozási gondolata.

A könyv felépítése követi az elhangzott előadások rendjét. Egy-egy főbb területnek egy-egy fejezet felel meg, aminek elején a plenáris előadás, azt követően pedig a kapcsolódó orális előadások találhatók. Külön részbe gyűjtötték össze a poszter előadások kivonatait. A vizsgált problémák öt átfogó téma köré csoportosíthatók.

Kilenc előadás foglalkozott az oszcilláló reakciókkal. A fő törekvés az előadásokból kivehetően új kémiai oszcillátorok felfedezése és az oszcillációra vehető tanfolyamok mechanizmusának felderítése. Meg kell említenem, hogy ezen a területen szép magyar eredmények is vannak, sőt talán már magyar iskoláról is beszélhetünk, amit az is illusztrál, hogy a plenáris előadás ötven hivatkozásából húsz utal magyar szerzőre.

Térbeli szerkezetek és kémiai hullámok a témája a következő nagyobb nyolc előadásból álló résznek. Míg az előzőekben a nemlineáris kémiai rendszerekben lejátszódó reakciók domináltak, itt inkább a kapcsolódó transzportfolyamatok és a kialakuló térbeli-időbeli mintázatok kerültek a kutatás fókuszába. Ez az elmélet oldaláról nemlineáris parciális differenciálegyenletek vizsgálatát jelenti, kísérleti téren pedig olyan új módszerek kidolgozását követeli meg, amelyeknek segítségével az egyes kémiai komponensek koncentrációját nemcsak időben lehet követni, hanem a térbeli eloszlás is pillanatról pillanatra feltérképezhető.

Három előadásból álló blokk foglalkozott a kémiai káosz divatos és sok vitát kiváltó kérdéskörével. A fő kérdés — ma már talán kevésbé, mint a legutóbbi konferencián — az, hogy egyáltalán létezik-e a kémiai káosz, vagyis a determinisztikus, de nem-periodikus viselkedés. A plenáris előadás ezt a kérdést igennel válaszolta meg, miközben felhívta a figyelmet a káosz és a kísérleti zajeffectusok nehéz megkülönböztethetőségére.

A külső perturbációknak kitett nemlineáris nyílt rendszerek vizsgálata volt a témája öt előadásnak. Azokról a nemtriviális zajeffectusokról hallhattak a résztvevők, amelyeknek során például új rendszer-állapotok jönnek létre kizárólag a külső zaj hatására. Hasonlóan érdekes eredmény az is, hogy a stationer állapotok stabilitása megváltozhat a környezeti zajok következtében.

Végül további négy orális előadás foglalkozott a nemegyensúlyi kémiai rendszerek sztochasztikus analízisének újabb eredményeivel. A vizsgálatok fókuszában az a kérdés állt, hogy hogyan alakul ki a koherencia és a hosszútávú rend az említett rendszerekben.

Igen heterogén, szerteágazó képet mutatott a harminchárom poszter, melyek között négy számolt be a magyar eredményekről. Azt, hogy a területen a hazai kutatásoknak ennél jóval nagyobb a súlya, abból is szíjjhatjuk, hogy az évenkénti tanácskozáskor színhelyül 1986-ban Magyarországot javasolták.

Vértés Ákos

P. Lambropoulos, S. J. Smith (ed.-s): Multiphoton Processes Springer Series on Atoms and Plasmas. 2.

Ismét új sorozatot indított a Springer kiadó „Atomok és Plazmák” címen. A sorozat első kötete Kessler Professor „Polarizált elektronok” c. nagyszerű könyvének második kiadása.

A sorozat második köteteként jelent meg „Sokfotonos folyamatok” címmel az 1984 szeptemberében Hérakleionban, Kréta fővárosában megrendezett 3. Nemzetközi Sokfotonos Folyamatok Konferencia meghívott előadásainak gyűjteménye. A konferenciát, bizonyos szempontból a viszonylag új tudományterület összefoglalásának szánták, ennek megfelelően csak meghívott előadások hangzottak el. Közel két évtized tudományos eredményeit, fejlődési tendenciáit próbálták rendszerezni, természetesen a kereteknek megfelelően a teljesség igénye nélkül.

Annak ellenére, hogy végül is nem kézikönyvről van szó, mégis mindenkinek melegen ajánlható a kötet, akit érdekel a modern optikának e különösen érdekes területe. A Sokfotonos folyamatok címszó ugyanis a nemlineáris optika azon jelenségeire utal, melyek leírásához kvantumos kép alkalmazása szükséges, mégpedig a magasabbrendű közelítések, ahol a szokásos perturbációs számítás már érvényét veszti.

A könyv három nagy fejezetre oszlik, ezek: Sokfotonos folyamatok atomokban; Térfluktuációk és ütközések sokfotonos folyamatokban; Sokfotonos folyamatok molekulákban és felületeken. Mivel minden előadás egy-egy nagy részterülettel foglalkozik, a 21 közül bármelyik kiemelése is önkényes lenne, de a „klasszikus” kvantumfizika művelői szinte mindegyik munkában meglepő új jelenségekkel találkozhatnak, az optikai tunnel emissziótól az ionizációs küszöb fölött, erős fényterekben kialakuló energianívókon fellépő, átmenetig igen széles skálán.

Érdemes megjegyezni, hogy e konferenciasorozat kezdeményezése Magyarországról indult. Először évenként változó néven két alkalommal, majd már 2. ICOMP néven harmadszor is hazánk volt e témakör kutatóinak vendéglátója. Mindez jelzi, hogy a hazai kutatás világszerte elismert színvonalú. A kötetben is található magyar előadás, s az irodalomjegyzékeket böngészve képet alkothatunk arról, hogy kutatóink itthoni önálló, később az anyagi lehetőségek csökkenésével, külföldi kooperációban végzett munkái milyen széles területet fednek le.

Hazai vonatkozásai miatt külön ajánlom a könyvet a kollégáknak. Hátha többen kapnak kedvet e nagyon érdekes és mind elméletileg mind kísérletileg még sok meglepetést tartalmazó kutatási terület további művelésére.

Horváth Zoltán György

**B. I. Shklovski, A. L. Efros: Electronic Properties of Doped Semiconductors
Springer-Verlag, 1984.
Springer Series in Solid. State Sciences 45**

A két szerző a leningrádi Ioffe-intézet munkatársa. Az orosz nyelvű munkát Serge Lutyi fordította le angolra. Azokkal a jelenségekkel foglalkozik, amelyek lényegében a szennyezett félvezetőkben rendszertelenül eloszló donorokkal és akceptorokkal függnek össze. Ilyenek az Anderson lokalizáció, az ugró vezetés, a szennyezőknek vagy a szennyezés szintje növelésének tulajdonítható fém-nemfém átmenetek, a sűrűség állapotok szélső értékével kapcsolatos optikai jelenségek stb. Ezeknek a kérdéseknek modern megközelítése a perkolációs (átszivárgás) elméleten alapszik. A könyv ennek az elméletnek a fizikai és nem annyira a matematikai aspektusaira helyezi a hangsúlyt, az erősen inhomogén közeg vezetőképességét tartva szem előtt, az ugró vezetés elméletét átfogóan tárgyalja, ismerteti az elektron-elektron kölcsönhatásnak szerepét a Coulomb csapdák létrehozása a sűrűség állapotában. A szerzők részletesen összevetik az elméleti és a kísérleti adatokat. Idevágó kísérleti adatokkal és komputer szimulációval is megismerkedhetünk e műben. A 4. fejezet az ugró (hopping) vezetés általános leírását adja a gyengén szennyezett félvezetők esetére. Ez az egész fejezet az ugró vezetés alapvető kísérleti tényeit tárgyalja és a legegyszerűbb modelleket mutatja be ezek értelmezésére. Ismerteti a hopping mechanizmussal végbemenő elektromos vezetés létrejöttéhez szükséges hőmérsékleti és kompenzációs fok tartományt. Kitér arra is, hogyan függ ez a vezetési mód a hőmér-

séklettől és a szennyezés koncentrációtól. Müller és Abrahams nyomán redukálja a hopping vezetés számításának problémáját azon vezetés számítására, amely a donorpárokkal kapcsolatos ellenállások random hálózataira vonatkoznak. A problémának ellenállások vagy vezetők átlagolásán alapuló naív megközelítései kritikailag elemzik. Megadják a hopping mechanizmus rövid definícióját is: A vezetési elektronok a hőmérséklet csökkentésével létrehozott fokozatos kifagyasztása vezet ahhoz a helyzethez, amelyben az elektromos vezetés fő része azoktól az elektronoktól származik, amelyek közvetlenül átugrálnak a szennyezők között anélkül, hogy előzőleg feljutottak volna a vezetési sávba. Ekkor elektronok ugranak az elfoglalt donorokból az üresekbe, tehát az ugró mechanizmus szükséges feltétele üres donorok létezése. Alacsony hőmérsékleteken ez a feltétel csupán kompenzáció folytán teljesülhet. A hopping mechanizmus különböző vonatkozásait különben hat fejezet tárgyalja. A szerzők 1975-ben felvetettek egy új elképzelést a Fermi-nívó szomszédságában keletkező Coulomb csapdára vonatkozóan, mely ha korrekt, akkor revidálni kell a változó terjedelmű hopping mechanizmusra vonatkozó Mott törvényt. Az orosz nyelvű kiadásban ez az elképzelés még nagyon óvatos formában szerepelt, de mivel azóta számos elméleti és kísérleti megerősítést nyert, a szerzők újra írták az angol kiadásban egy külön fejezetben (14.-ben) ezt a részt.

/ T. Gy.:/

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó és Nyomda főigazgatója
Műszaki szerkesztő: Sándor István
A kézirat a nyomdába érkezett: 1985. november 29. — Terjedelem: 8,05 (A/5) iv
86-4737 — Szegedi Nyomda — F. v.: Surányi Tibor igazgató

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Sütő András</i> : Fázisátalakulások és korrelációk frusztrált Ising modellekben	201
<i>Lovas I., Greiner W., Hraskó P., Lovas E. és Sailer K.</i> : Gluon-kondenzáció kvark-gluon plazmában	277

KÖNYVISMERTETÉS

<i>C. Vidal and A. Pacault (eds)</i> : Non-equilibrium Dynamics in Chemical Systems	291
<i>P. Lambropoulos, S. J. Smith (eds)</i> : Multiphoton Processes	292
<i>B. I. Shklovski, A. L. Efros</i> : Electronic Properties of Doped Semiconductors.....	292

307.226

IV. 9
60

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

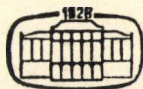
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXIV. KÖTET

4. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1986

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló ellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klaszszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet
1444 Budapest VIII., Postafiók 263.

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 90 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21, (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32, (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetésnek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölgék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

ROTON—ROTON KÖLCSÖNHATÁS ELMÉLETE A SZUPERFOLYADÉKOK He_4 -BEN*

TÜTTŐ ISTVÁN

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

TARTALOM

Bevezetés	293
I. Kölcsönható Bose rendszer vizsgálata	297
1. Kölcsönható Bose rendszer leírása	297
2. Kollektív koordináták módszere	303
3. Korrelált bázis függvények módszere	305
II. Modell az elemi gerjesztések közötti kölcsönhatás vizsgálatára	308
1. Egy kölcsönható Bose rendszer gerjesztett állapotainak leírása kvázirészecskék segítségével	309
2. A több gerjesztést tartalmazó állapotok megjelenése a dinamikus struktúra faktorban	312
3. A szuperfolyékony hélium alapállapotának néhány jellemzője	315
4. A szuperfolyékony hélium elemi gerjesztései közötti kölcsönhatások	317
III. Kétronos állapotok	320
1. A kétronos állapotok leírása	320
2. Kétronos állapotsűrűség $K=0$ esetén	322
3. Roton—roton kölcsönhatás	326
4. Kétronos állapotsűrűség $K \neq 0$ esetén	329
IV. A rotonok élettartamának és energiájának hőmérsékletfüggése	330
V. A kétronos állapotok és az egy gerjesztést tartalmazó állapotok közötti kölcsönhatás következményei	339
VI. Leárnýkolt potenciálok módszere	348
VII. A rotonok közötti kölcsönhatás	352
Összefoglalás	356
Függelék	360
Irodalom	361

BEVEZETÉS

Kammerling Onnesnek 1908-ban sikerült cseppfolyósítania a héliumot. A hélium forráspontja légköri nyomáson 4,2 K és 2,5 Mpa-nál kisebb külső nyomás esetén még zérus hőmérsékleten is folyadék állapotban marad. 1911-ben ugyancsak Kammerling Onnes fedezte fel, hogy 2,17 K hőmérsékleten a hélium egy másodrendű fázisátalakuláson megy keresztül. (A magasabb hőmérsékletű fázist HeI , az alacsonyabb hőmérsékletű fázist HeII -nek nevezzük.) Ez a fázisátalakulás a fájhő hőmérsékletfüggésének az alakjáról — a görög λ betűre hasonlít — a λ átalakulás nevet kapta. Az alacsonyabb hőmérsékletű folyadék fázis legszembeötlőbb tulajdonsága az, hogy a folyadék viszkozitása a fázisátalakulás során ugrásszerűen lecsökken.

* Érkezett: 1984. április 13. Kandidátusi értekezés.

Ennek a tulajdonságának a következtében ezt a fázist szuperfolyékony héliumnak nevezik.

A szuperfolyékony hélium anomális termodinamikai és hidrodinamikai tulajdonságainak a megértésére felfedezése óta nagyon széles körű kísérleti és elméleti kutatás folyik [1]. Egyrészt kísérletileg megpróbálták ezeket a tulajdonságokat olyan részletesen, ahogyan csak lehetséges megmérni és megmagyarázni, másrészt elméletileg a hélium atomok között kölcsönhatásokból kiindulva megérteni ezeket a tulajdonságokat.

A szuperfolyékony hélium iránti érdeklődés oka a következő:

A természetben található hélium gyakorlatilag 100%-ban He_4 atomokból áll. (A He_3 izotóp koncentrációja kb. 10^{-6} .) A He_4 atomok zárt elektronhéjjal rendelkeznek mind az elektronrendszerüknek, mind az atommagjuknak a spinje zérus. Amíg az atomi gerjesztett állapotok energiája eV nagyságrendű, addig a folyadék állapotban az egy atomra jutó átlagos energia 10^{-3} eV nagyságrendbe esik. Ezért a folyadék állapotban a He_4 atomokat gömbszimmetrikus potenciállal rendelkező Bose részecskéknek tekinthetjük. A He_4 atomok kis tömege és a közöttük fellépő potenciál gyengesége következtében a folyadék állapotban az egy atomra jutó potenciális energia és az atomok kinetikus energiája — amely alacsony hőmérsékleten döntő részben az atomok zérusponti mozgásából áll — közel egyforma. Ez az oka annak, hogy a hélium külső nyomás nélkül még zérus hőmérsékleten is folyadék állapotban marad. Erről a tulajdonságáról, hogy a hélium alapállapotát az atomok zérusponti mozgása határozza meg, kvantumfolyadéknak is nevezik. Ilyen módon a szuperfolyékony hélium tulajdonságainak a vizsgálatával egy tiszta Bose rendszer megismerésére nyílik lehetőség. (Hasonló módon a He_3 izotópokból álló rendszer vizsgálatával egy Fermi rendszer megismerésére nyílik lehetőség.)

Alacsony hőmérsékleten egy sokrészecskés rendszer tulajdonságait az alapállapothoz közeli energiájú állapotok határozzák meg, amelyek a rendszer elemi gerjesztéseit adják. A szuperfolyékony hélium makroszkopikus tulajdonságainak értelmezésére Landau [2] két típusú elemi gerjesztés létezését tételezte fel. A nagy hullámhosszú tartományban a rendszer legalacsonyabb energiájú gerjesztett állapotai a sűrűségfluktuációk — a fonongerjesztések —, amelyek energiája a gerjesztés hullámszámával arányos. $E_k = ck^*$, ahol c a hang terjedési sebessége a folyadékban. Landau feltételezte, hogy a fonon gerjesztések mellett a szuperfolyékony héliumban létezik egy másik típusú gerjesztés is, amely egy véges k_0 hullámszám környékén jelenik meg, melynek energiája a k_0 hullámszám környékén:

$$E_k = \Delta + \frac{(k - k_0)^2}{2\mu_0}$$

Ezeket a gerjesztéseket Tamm javaslatára rotonoknak nevezte el. Δ a roton energiája és μ_0 a roton tömege.

Feynman [3] mutatta meg először, hogy a Landau által javasolt két típusú gerjesztés egy gerjesztési spektrum két különböző hullámszám tartományát írja le. Feynman megmutatta, hogy egy Bose rendszer alacsony energiájú gerjesztett állapotai kifejezhetőek a rendszer sűrűségfluktuációinak a segítségével. Az elemi gerjesztések energiájára a Feynman által kapott $E_k = k^2/2mS(k)$ kifejezés ($S(k)$ a

* A disszertációban az egyszerűség kedvéért a $\hbar=1$ és a $k_B=1$ választással élünk.

folyadék struktúra faktora) helyesen adja vissza a fonongerjesztéseket, de a nagyobb hullámszámok tartományában a kísérletileg megfigyelt gerjesztési energiáknál lényegesen nagyobb értéket ad. A Feynman által adott modellt *Feynman* és *Cohen* [4] fejlesztette tovább, figyelembe véve, hogy a hélium atomok taszító törzsei átlapolódásának elkerülésére egy, a folyadékban mozgó hélium atom maga körül egy áramlási teret hoz létre. A szuperfolyékony hélium elemi gerjesztéseinek Feynman—Cohen modellje már kvantitatíve is elfogadhatóan írja le a fonon-roton gerjesztések energiáját.

A szuperfolyékony hélium elemi gerjesztései lassú neutronok inelasztikus szórásával történő kimérésének lehetőségére *Cohen* és *Feynman* [5] hívta fel a figyelmet. A kísérletek [6] szépen igazolták a Landau—Feynman-féle elképzelés helyességét.

A szuperfolyékony hélium iránti érdeklődés vezetett el egy kölcsönható Bose rendszer mikroszkopikus elméletének kidolgozásához. *Bogoljubov* [7] mutatta meg, hogy egy gyengén kölcsönható Bose rendszer legalacsonyabb energiájú gerjesztett állapotai a hosszú hullámhosszú fonongerjesztések. A szuperfolyékony hélium közel sem tekinthető egy gyengén kölcsönható Bose rendszernek és emiatt eddig sem sikerült kielégítő mikroszkopikus elméletet (a hélium atomok között potenciálból kiinduló) adni a rendszer tulajdonságainak a leírására. Ugyanakkor a térelméleti módszerek alkalmazása egy kölcsönható Bose rendszerre számos fontos eredményre vezetett [10]. Ezek közül a leglényegesebb az a megállapítás, hogy a Bose kondenzáció fellépése esetén a rendszer sűrűségfluktuációinak és az egyrészcsekés gerjesztéseinek az energiája azonos [8, 9].

A szuperfolyékony hélium kinetikai tulajdonságait az elemi gerjesztések közötti kölcsönhatások határozzák meg. Alacsony hőmérsékleten — amíg kevés elemi gerjesztés van a rendszerben — az elemi gerjesztések egy gyengén kölcsönható gázként foghatók fel. Az elemi gerjesztések között kontakt kölcsönhatást feltételezve *Landau* és *Khalatnikov* [11] Born közelítésben kiszámolták a különböző kinetikai tulajdonságokat. A kísérleti adatokkal való összehasonlításból látszik, hogy alacsony hőmérsékleten ($T < 1$ K) a fonongerjesztések, magasabb hőmérsékleten a rotongerjesztések határozzák meg a rendszer tulajdonságait.

Az utóbbi években a mérés technika fejlődésével a szuperfolyékony hélium gerjesztett állapotairól való ismereteink lényegesen kibővültek. A neutronszerkezési kísérletekben — a felbontóképeség növelésével — a gerjesztési spektrum finomabb részletei is láthatóvá váltak. A lézerek alkalmazásával lehetőség nyílt a szuperfolyékony hélium másodrendű Raman spektrumának kimérésére.

Ezen kísérletek eredményei rámutattak arra, hogy a Landau—Feynman-féle gerjesztési spektrum csak az alacsonyán fekvő gerjesztett állapotokat írja le helyesen. Ahogy azt *Pitaevskij* [12] megmutatta, a Landau—Feynman-féle gerjesztési spektrum érvényét veszti, ha az egy gerjesztést tartalmazó állapotok energiája eléri a két roton tartalmazó állapot energiáját, mivel ekkor a gerjesztett állapotnak lehetősége nyílik a két rotonra való bomlásra. Az egy gerjesztést tartalmazó állapotok és a két-rotonos állapotok közötti kölcsönhatás következtében a neutronszerkezési spektrumban megjelennek a kétrotonos állapotok és a gerjesztési spektrum két ágra bomlik fel [13].

A szuperfolyékony hélium másodrendű Raman spektrumában a szórt fény intenzitása a kétszeres roton-energia környékén az olyan kétrotonos állapotok állapotsűrűségével lesz arányos, amelyeknél a két roton eredő hullámszáma közel zérus. A *Greystak* és *munkatársai* által elvégzett kísérletek [14] eredményei azt mu-

tatják, hogy a két rotonos állapotsűrűség lényegesen eltér attól az esettől, amikor a rotonok egymással nem hatnak kölcsön. A kétrotonos állapotok az alacsonyabb energiák felé tolódnak el — mutatva, hogy a rotonok között egy vonzó jellegű kölcsönhatás lép fel — és a két rotonos kontinuum alatt talált éles csúcsot *Ruvalds* és *Zawadowski* [15], majd tőlük függetlenül *Iwamoto* [16], mind a két roton kötött állapotát értelmezték.

Ezek a kísérleti adatok rámutattak arra a tényre, hogy a szuperfolyékony hélium magasabb energiájú gerjesztett állapotai közül a két rotonot tartalmazó állapotok a leglényegesebbek. A rotonok zérus körüli csoport sebességgel rendelkeznek. Emiatt, ha két roton ütközik, akkor azok hosszú ideig egymás közelében maradnak. Ilyen módon a roton—roton kölcsönhatás következményeinek a vizsgálata nem tárgyalható Born közelítésben, hanem a rotonok egymáson való többszörös szóródásának a lehetőségét — a végállapatkölcsönhatásokat — is figyelembe kell venni.

A különböző közelítő módszerekkel a szuperfolyékony hélium elemi gerjesztései elég jól leírhatóak, de ezek a modellek — jellegüknél fogva — csak a legacsonyabb energiájú gerjesztett állapotok leírására alkalmasak, és így nagyon keveset tudnak mondani a szuperfolyékony hélium speciális elemi gerjesztéseinek, a rotonoknak egymással való kölcsönhatásáról. A disszertációban a rotonok közötti kölcsönhatás vizsgálatát tűztük ki célul.

Az I. fejezetben egy kölcsönható Bose rendszer elemi gerjesztései leírásának módszereit ismertetjük. A II. fejezetben ismertetjük azt a modellünket, amellyel a rotonok közötti kölcsönhatás következményeit vizsgáljuk. A modell azon alapul, hogy a kísérleti adatok szerint a szuperfolyékony hélium elemi gerjesztéseinek az élettartama — energiájukhoz viszonyítva — nagyon hosszú, ezért a gerjesztések jól definiált, egymással csak gyengén kölcsönható kvázirészecskének tekinthetők. A rotonok közötti kölcsönhatást egy paraméternek tekintett Γ_4 vertexel írjuk le. A roton—fonon diszperzió speciális alakja következtében a roton—roton ütközés során a különböző impulzusmomentumú kétrotonos állapotok — ha a két roton eredő hullámszáma $K \neq 0$ — egymással keverednek. Ezért a kétrotonos állapotokat a különböző m helicitás kvantumszámmal jellemezhető állapotok összegeként állítjuk elő. Az egyes m helicitású kétrotonos állapotban a rotonok közötti kölcsönhatást a g_{4m} roton—roton csatolásokkal írjuk le. A III. fejezetben röviden ismertetjük a két roton közötti állapotának kialakulását és annak a szuperfolyékony hélium másodrendű Raman spektrumában való megjelenését. Megvizsgáljuk a fononok szerepét a két roton kötött állapotának a két fononra való bomlása a kötött állapot véges élettartamához vezet. Megmutatjuk, hogy deformációs potenciál közelítésben a kétrotonos állapotok és a kétfononos állapotok közötti kölcsönhatás harmadrendű roton—fonon vertexek segítségével leírható és a kísérleti eredményekből nyerhető roton-fonon csatolások segítségével a kötött állapot véges élettartama kvantitatív módon értelmezhető.

A IV. fejezetben a rotonok energiájának és élettartamának a hőmérsékletfüggését tárgyaljuk. Megmutatjuk, hogy a roton—roton ütközésnél fellépő intenzív végállapatkölcsönhatás következményeként, ha a rotonok között egy kontakt kölcsönhatást tételezünk fel, sem a rotonok élettartamának, sem a rotonenergia kísérletekből ismert hőmérsékletfüggése nem kapható meg. Megmutatjuk, hogy egy adott m helicitású kétrotonos állapotból származó roton sajátenergia a rotonok élettartama hőmérsékletfüggésének csak 1/4-ed, a rotonenergia hőmérsékletfüggésének csupán 1/6-od részét képes leírni. Ezek az eredmények azt mutatják, hogy leg-

alább 6—7 különböző m helicitás kvantumszámhoz tartozó g_{4m} roton—roton csatolás vonzó és erős. Az V. fejezetben a két rotont tartalmazó állapotoknak az egy gerjesztést tartalmazó állapotokkal való kölcsönhatásával foglalkozunk. Megvizsgáljuk, hogy az egy gerjesztést tartalmazó állapotnak a két rotonra való bomlása hogyan befolyásolja a szuperfolyékony hélium elemi gerjesztési spektrumát. Megmutatjuk, hogy a neutronszerzési spektrumban csak az $m=0$ helicitású kétrotonos állapotok jelennek meg és azt, hogy a rotonok közötti $g_{4m=0}$ csatolás szerepét egy effektív csatolás veszi át. A kísérleti eredmények azt mutatják, hogy ezen $g_{4\text{eff}}$ roton—roton csatolás szintén negatív és értéke nagyon jó egyezésben van a roton paraméterei hőmérsékletfüggésének értelmezéséhez szükséges roton—roton csatolások értékével.

A VI. fejezetben a rotonok tulajdonságainak a jobb megértése érdekében megvizsgáljuk a Pines által javasolt rotonok között fellépő vektorpotenciál eredetét.

A VII. fejezetben összefoglaljuk a rotonok közötti kölcsönhatás tulajdonságait. Megállapítható, hogy a rotonok közötti kölcsönhatást hosszú hullámhosszú gerjesztések — fononok — közvetítik. Megmutatjuk, hogy a Feynman és Cohen által javasolt dipóltér jellegű roton—roton kölcsönhatás nem képes a kísérleti eredmények leírására. A rotonok közötti kölcsönhatás a dipóltértől lényegesen eltérő irányfüggéssel rendelkezik.

I. KÖLCÖNHATÓ BOSE RENDSZER VIZSGÁLATA

Ebben a fejezetben egy kölcsönható Bose rendszer elemi gerjesztéseinek általános tulajdonságait és a szuperfolyékony hélium elemi gerjesztéseinek leírására két leggyakrabban használt módszert ismertetjük. Az I.1. fejezet egy kölcsönható Bose rendszer mikroszkopikus tárgyalásának módszerét tartalmazza. A térelmélet módszereinek a felhasználásával számos szerző foglalkozott a Bose rendszerek elméletével [8, 9, 10]. Mi elsősorban *Gavoret* és *Nozieres* [8] munkája alapján megmutatjuk, hogy a Bose kondenzáció fellépése esetén egy kölcsönható Bose rendszer alacsony energiás gerjesztett állapotai a sűrűségfluktuációk. Az I.2. fejezetben egy erősen kölcsönható Bose rendszer leírására szolgáló, *Bogoljubov* és *Zubarev* [17] által bevezetett, és *Sunakawa* és *munkatársa* [18] által továbbfejlesztett kollektív koordináták módszerét ismertetjük. Ez a módszer a Landau által fenomenologikus módon bevezetett kvantum hidrodinamika [11] elméleti megalapozását adja. Az I.3. fejezetben a szuperfolyékony hélium elemi gerjesztéseinek leírására leggyakrabban használt módszert, a *Feenberg* [19] által kidolgozott korrelált bázis függvények módszerét ismertetjük.

I.1. Kölcsönható Bose rendszer leírása

Tekintsünk egy Ω térfogatba zárt N darab, egyenként m tömegű, spin nélküli Bose részecskék rendszerét $T=0$ hőmérsékleten. Legyenek $\psi(x)$ és $\psi^+(x)$ a térelméletben szokásos Bose téroperátorok Heisenberg reprezentációban. Egyszerűség kedvéért a tér és idő koordinátákat röviden $x=(\vec{r}, t)$ -vel jelöljük. A téroperátorokra a

$$\psi_{\alpha}(x) = \begin{cases} \psi(x) & \alpha = + \\ \psi^+(x) & \alpha = - \end{cases} \quad (1.1)$$

spinor jelölésmódot bevezetve, a felcserélési relációjuk:

$$[\psi_\alpha(x), \psi_\beta^+(x')]\delta(t-t') = \alpha\delta_{\alpha\beta}\delta(x-x').$$

Fejezzük ki a téroperátorokat a részecske keltő és eltüntető operátorokkal:

$$\psi_\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_k a_k^\alpha(t) e^{ikl}; \quad a_k^\alpha = \begin{cases} a_k & \alpha = + \\ a_{-k}^\dagger & \alpha = - \end{cases}. \quad (1.2)$$

A rendszer részecskéinek a száma $N = \langle a_k^+ a_k \rangle$, ahol $\langle \rangle$ a várható értéket jelenti, amely $T=0$ hőmérsékleten az alapállapotú várható értéknek felel meg. Ha N és Ω végtelenhez tart úgy, hogy közben a rendszer átlagos sűrűsége $n = \frac{N}{\Omega}$ rögzített érték marad, akkor a Bose kondenzáció fellépése azt jelenti, hogy a $k=0$ állapot makroszkopikusan van betöltve, azaz a kondenzátum sűrűsége $n_0 = \frac{\langle a_0^+ a_0 \rangle}{\Omega} = \frac{N_0}{\Omega}$ egy véges értékhez tart. Az ebből adódó nehézségek elkerülésére *Bogoljulov* [7] feltételezte, hogy az a_0^α operátorok egy számmal helyettesíthetők: $a_0^\alpha = \sqrt{N_0} e^{i\alpha\varphi}$, ahol φ egy tetszőleges fázis, amelyet például zérusnak választhatunk. Ezzel a kondenzátumot leválasztva, azt mint egy külső teret vesszük figyelembe. Ilyen módon azokat az állapotokat, amelyek csak a kondenzált állapotban levő részecskék számában különböznek egymástól, ekvivalensnek tételezzük fel. A makroszkopikus betöltöttségű kondenzátum ilyen módon való leválasztásával a nem kondenzált állapotban levő részecskékre kondenzált állapottal való kölcsönhatás miatt nem áll fenn a részecskeszám megmaradása. Emiatt célszerűbb a részecskeszám helyett a rendszer μ kémiai potenciálját rögzítettnek tekinteni, azaz a rendszer eredeti H Hamilton operátoráról áttérünk a $H' = H - \mu N$ Hamilton operátorra.

A téroperátorokkal a sűrűség, illetve az áram operátorokat a következőképpen fejezhetjük ki:

$$\varrho(x) = \psi^+(x) \psi(x) \quad (1.3)$$

$$\vec{J}(x) = \frac{i}{2m} \{ \nabla \psi^+(x) \psi(x) - \psi^+(x) \vec{\nabla} \psi(x) \}. \quad (1.4)$$

A sűrűség operátor várható értéke a rendszer átlagos sűrűsége: $\langle \varrho(x) \rangle = n$. Alapállapotban a rendszerben nem folyik áram, ezért az áram várható értéke zérus. Az áramot és a sűrűséget a kontinuitási egyenlet köti össze egymással:

$$\frac{\partial \varrho(x)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(x) = 0. \quad (1.5)$$

A rendszer gerjesztett állapotait a korrelációs függvényekből határozhatjuk meg. A rendszer sűrűség fluktuációit az

$$F(x, x') = -i \langle T \{ \varrho(x), \varrho(x') \} \rangle \quad (1.6)$$

sűrűség—sűrűség korrelációs függvény határozza meg, ahol T az időrendezés operátora. A rendszer egyrészecskés gerjesztéseit a

$$G_{\alpha\beta}(x, x') = -i \langle T \{ \psi_{\alpha}(x) \psi_{\beta}^{\dagger}(x') \} \rangle \quad (1.7)$$

egyrészecskés Green függvényből határozhatjuk meg [20].

Elvileg $F(x, x')$ és $G_{\alpha\beta}(x, x')$ perturbáció számítással meghatározható. A kondenzátum jelenléte következtében azonban az egy és két részecskét tartalmazó állapotok egymással keverednek, ezért célszerű az egyrészecskés és a kétrészecskés korrelációs függvények közötti kapcsolatot meghatározni.

A sűrűség—sűrűség korrelációs függvény mellett vezessük be a sűrűség—áram és az áram—áram korrelációs függvényeket a következőképpen:

$$F_i(x, x') = -i \langle T \{ \rho(x), J^i(x') \} \rangle \quad (1.8a)$$

$$F_{ij}(x, x') = -i \langle T \{ J^i(x), J^j(x') \} \rangle, \quad (1.8b)$$

ahol $J^i(x)$ az áram i -edik komponensét jelöli.

A rendszert homogénnek és izotrópnek tételezve fel, a korrelációs függvények csak a tér, illetve időváltozók különbségétől függnek. Ezért a Fourier transzformálásra térünk át a következő definícióval:

$$f(x - x') = \sum_p f(p) e^{ipx}, \quad (1.9)$$

ahol a következő jelöléseket vezettük be:

$$p = (\omega, \vec{k}), \quad px = \vec{k}\vec{r} - \omega t, \quad \sum_p = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi}. \quad (1.9b)$$

Ha a z tengelyt a \vec{k} irányával párhuzamosan vesszük fel, akkor a kontinuitási egyenlet felhasználásával a fenti korrelációs függvények között a következő összefüggéseket kapjuk:

$$\omega F(p) = k F_z(p) \quad (1.10a)$$

$$\omega^2 F(p) = k^2 \left(F_L(p) + \frac{N}{m} \right) \quad (1.10b)$$

$F_L(p) = F_{zz}(p)$, a longitudinális áram—áram korrelációs függvény. A transzverzális áram—áram korrelációs függvény $T=0$ hőmérsékleten eltűnik.

A rendszer egyrészecskés gerjesztéseit az egyrészecskés Green-függvény Fourier transzformáltjának a pólusai határozzák meg. Ha a rendszer Hamilton operátorát két részre bontjuk fel: $H = H_0 + H_I$, ahol H_0 a szabad részecskék Hamilton operátora és H_I írja le a szabad részecskék közötti kölcsönhatást, akkor Heisenbert reprezentációról a kölcsönhatási reprezentációra áttérve az egyrészecskés Green-függvény [20]:

$$G_{\alpha\beta}(x, x') = -i \frac{\langle T \{ \bar{\Psi}_{\alpha}(x) \bar{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(x') S \} \rangle_0}{\langle S \rangle_0}, \quad (1.11)$$

ahol $\bar{\psi}_\alpha$ jelöli a téroperátorokat kölcsönhatási reprezentációban, $\langle \rangle_0$ a szabad részecskék alapállapota szerinti várható értéket jelent és

$$S = T \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^{\infty} H_I(t') dt' \right\}. \quad (1.12)$$

A szabad részecskék Green-függvényét bevezetve:

$$G_{\alpha\beta}^{(0)}(x, x') = -i \langle T \{ \bar{\Psi}_\alpha(x) \bar{\Psi}_\beta^+(x') \} \rangle_0 \quad (1.13)$$

a teljes Green-függvényre a következő Dyson egyenletet írhatjuk fel:

$$G_{\alpha\beta} = G_{\alpha\beta}^{(0)} + G_{\alpha\gamma}^{(0)} \Sigma_{\gamma\delta} G_{\delta\beta}, \quad (1.14)$$

ahol $\Sigma_{\alpha\beta}$ az egyrészecskés sajátenergia. Fourier transzformáltakra átvérve, a szabad Green-függvény:

$$G_{\alpha\beta}^{(0)}(p) = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{\alpha\omega - \varepsilon_k + \mu}, \quad (1.15)$$

ahol $\varepsilon_k = \frac{k^2}{2m}$, a szabad részecske energiája. A Green-függvény szimmetriáinak a felhasználásával a sajátenergiát a következőképpen bonthatjuk fel:

$$\Sigma_{\alpha, \alpha} = \alpha \Sigma'_1 + \Sigma_1 \quad (1.16a)$$

$$\Sigma_{\alpha, -\alpha} = \Sigma_2, \quad (1.16b)$$

ahol Σ_1 , Σ_2 és Σ'_1 , mind k -ban, mind ω -ban páros függvények. Az egyrészecskés Green-függvény a sajátenergiákkal kifejezve a következő alakba írható:

$$G_{\alpha\beta} = \frac{N_{\alpha\beta}}{D}, \quad (1.17)$$

ahol

$$N_{\alpha\alpha} = \alpha\omega(1 - \Sigma'_1) + \varepsilon_k - \mu + \Sigma_1; \quad N_{\alpha, -\alpha} = -\Sigma_2 \quad (1.18a)$$

$$D = \omega^2(1 - \Sigma'_1)^2 - (\varepsilon_k - \mu + \Sigma_1 - \Sigma_2)(\varepsilon_k - \mu + \Sigma_1 + \Sigma_2). \quad (1.18b)$$

Az egy- és kétrészecskés állapotok keveredésének leírására bevezetjük a sűrűség-részecske, illetve az áram-egyrészecske korrelációs függvényeket:

$$e_\alpha(x, x') = -i \langle T \{ \varrho(x), \psi_\alpha^+(x') \} \rangle \quad (1.19a)$$

$$e_\alpha^i(x, x') = -i \langle T \{ J^i(x), \psi_\alpha^+(x') \} \rangle. \quad (1.19b)$$

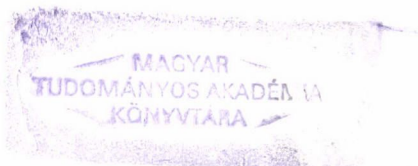
Fourier transzformáltakra átvérve, a kontinuitási egyenlet felhasználásával a következő összefüggést kapjuk ezen két korrelációs függvény között:

$$\omega e_\alpha(p) - k e_\alpha^z(p) = \alpha \sqrt{N_0}. \quad (1.20)$$

A sűrűség-részecske, illetve az áram-részecske korrelációs függvényekből leválaszthatunk egy egyrészecskés Green-függvényt:

$$e_\alpha(p) = A_\beta(p) G_{\alpha\beta}(p) \quad (1.21a)$$

$$e_\alpha^z(p) = A_\beta^z(p) G_{\alpha\beta}(p), \quad (1.21b)$$



ahol A_α és A_α^i a sűrűség-egyrészecske, illetve az áram-egyrészecske vertexek. e_α és e_α^i szimmetria tulajdonságainak a felhasználásával a vertexeket a következő alakban vehetjük fel:

$$A_\alpha = \sqrt{N_0} (1 + \lambda + \alpha \omega \lambda') \quad (1.22a)$$

$$A_\alpha^z = \frac{k \sqrt{N_0}}{2m} (\omega \lambda_z + \alpha (1 + \lambda)), \quad (1.22b)$$

ahol λ , λ' , λ_z és λ'_z mind ω -ban, mind k -ban páros függvények. Az 1.20-as összefüggésbe az 1.21, 1.22-es felbontásokat beírva, az egyrészecskes Green-függvény 1.17, 1.18-as alakjának a felhasználásával a következő összefüggéseket kapjuk a sajátenergiák és a vertexek között:

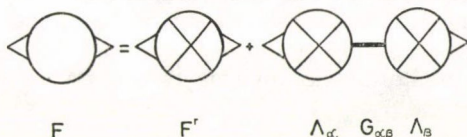
$$\Sigma'_1 = \varepsilon_k \lambda_z - \lambda \quad (1.23a)$$

$$\Sigma_1 - \Sigma_2 - \mu = \varepsilon_k \lambda'_z - \omega^2 \lambda'. \quad (1.23b)$$

A sűrűség fluktuációk és az egyrészecskes gerjesztések közötti kapcsolat megállapítására a sűrűség—sűrűség korrelációs függvényből leválaszthatjuk az egyrészecskes állapotok járulékat a következő felbontással:

$$F = F^r + A_\alpha G_{\alpha\beta} A_\beta. \quad (1.24)$$

Diagramokkal ezt a következőképpen reprezentálhatjuk:



Az F^r proper sűrűség—sűrűség korrelációs függvény azon diagramok összessége, amelyek nem tartalmaznak egyrészecskes közbenső állapotot. Hasonló módon F_z és F_L is két részre bontható:

$$F_z = F_z^r + A_\alpha^z G_{\alpha\beta} A_\beta \quad (1.25a)$$

$$F_L = F_L^r + A_\alpha^z G_{\alpha\beta} A_\beta^z. \quad (1.25b)$$

A proper korrelációs függvények és a vertexek között a következő összefüggések állnak fenn:

$$\omega(F^r + 2N_0 \lambda') = k F_z^r \quad (1.26a)$$

$$\omega^2(F^r + 2N_0 \lambda') = k^2 \left(\frac{N}{m} + F_L^r - \frac{N_0}{m} (1 + \lambda'_z) \right). \quad (1.26b)$$

Ilyen módon mind az egyrészecskes Green-függvényt, mind a sűrűség—sűrűség korrelációs függvényt kifejeztük egyrészecskes közbenső állapotot nem tartalmazó — proper — mennyiségek segítségével. Látható (1.24), hogy az egyrészecskes Green-függvény pólusai a sűrűség—sűrűség korrelációs függvénynek is pólusai. Az egy-

részecskés Green-függvény pólusait a következő egyenlet határozza meg (1.18b):

$$\omega^2(1 - \Sigma_1')^2 = (\varepsilon_k - \mu + \Sigma_1 - \Sigma_2)(\varepsilon_k - \mu + \Sigma_1 + \Sigma_2). \quad (1.27)$$

A $p \rightarrow 0$ határesetet vizsgálva először is meg kell jegyeznünk, hogy a proper mennyiségek — mivel egyrészecskés közbenső állapotot nem tartalmaznak — legfeljebb logaritmikusan divergálnak a $p \rightarrow 0$ esetén. Ilyen módon 1.23b jobb oldala zérushoz tart, azaz

$$\mu = \lim_{p \rightarrow 0} (\Sigma_1(p) - \Sigma_2(p)). \quad (1.28)$$

Ez a Hugenholtz—Pines tétel [21], amelyből 1.27 felhasználásával az következik, hogy az egyrészecskés gerjesztési spektrumban nincs gap és az egyrészecskés gerjesztések energiája a $k \rightarrow 0$ esetén:

$$E_k = ck, \text{ ahol } c^2 = \left(\frac{\frac{N}{N_0} \Sigma_2}{(1 + \lambda)^2 + 2\Sigma_2 \lambda'} \right)_{p=0}. \quad (1.29)$$

Felhasználtuk, hogy $F_L \propto k^2$ és így 1.26b alapján $\lim_{d \rightarrow 0} (1 + \lambda_z) = \frac{N}{N_0}$. Ilyen módon egy kölcsönható Bose rendszer legalacsonyabb energiájú gerjesztései a hosszú hullámhosszú sűrűségfluktuációk, a fononok. Az egyrészecskés Green-függvény pólusaiként megjelenő „egyrészecskés” gerjesztések a sűrűség—sűrűség korrelációs függvényben is megjelennek és így maguk is sűrűség-fluktuációk.

Ha konkrét számolást akarunk elvégezni, akkor a kölcsönhatási Hamilton operátor hatványai szerint haladó perturbációszámítást kell alkalmaznunk. A kölcsönhatási Hamilton operátor alakja impulzus reprezentációban:

$$H_I = \frac{1}{2\Omega} \sum V_q a_{\vec{k}_1 + \frac{q}{2}}^+ a_{\vec{k}_2 - \frac{q}{2}}^+ a_{\vec{k}_2 + \frac{q}{2}} a_{\vec{k}_1 - \frac{q}{2}}, \quad (1.30)$$

ahol V_q a Bose részecskék közötti $V(r)$ potenciál Fourier transzformáltja.

Egy gyengén kölcsönható Bose gáz gerjesztési spektrumát először *Bogoljubov* határozta meg [7]. Az ún. Bogoljubov közelítésnél a V_q potenciál első hatványait tartalmazó tagok közül is csak azokat tartjuk meg, amelyek a kondenzátum betöltöttségével arányosak. Ebben a közelítésben a gerjesztési spektrum.

$$E_k^B = \sqrt{\varepsilon_k \left(\frac{2N_0 V_k}{\Omega} + \varepsilon_k \right)} \quad (1.31)$$

alakú. A Bogoljubov közelítésnél a rendszer alapállapotában gyakorlatilag még teljes a Bose kondenzáció, $N_0 \approx N$.

A reális héliumra ez a módszer nem nagyon alkalmazható a következő miatt. A hélium atomok között kis távolságoknál a merev elektron felhő következtében egy nagyon erős taszítás lép fel. Ilyen módon a hélium atomok közötti potenciál Fourier transzformáltja kis hullámszámok esetén nagyon nagy lesz és emiatt egy, a V_q hatványai szerint haladó perturbációs sor csak nagyon lassan konvergál.

A reális héliumhoz közeledve egy másik lehetőség az, hogy a perturbációszámítást nem a hélium atomok közötti V_q potenciál hatványai szerint haladva

végezzük, hanem két hélium atom egymáson való többszörös szóródását is figyelembe véve, a potenciál helyett a két szabad hélium atom szórási amplitúdójának hatványai szerint haladó perturbációszámítást végzünk. Evvel a módszerrel Beliaev [22] — a szórási amplitúdóban másodrendig elmenve — meghatározta egy kölcsönható Bose gáz gerjesztési spektrumát. Sajnálatos módon azonban ez a közelítés is csak egy kis sűrűségű Bose rendszer hosszú hullámú gerjesztéseinek leírására alkalmazható.

1.2. Kollektív koordináták módszere

Egy kölcsönható Bose rendszer elemi gerjesztéseinek mikroszkopikus leírására egy másik lehetőség, az ún. kollektív koordináták módszere. Ez tulajdonképpen a Landau által kifejlesztett kvantum hidrodinamika [11] sikere alapján, annak mikroszkopikus elmélettel való megalapozása során fejlődött ki.

Landau feltételezte, hogy a szuperfolyékony hélium a hosszú hullámhosszú viselkedés szempontjából kontinuumnak tekinthető és arra a klasszikus hidrodinamikához hasonló egyenletek írhatók fel. Egy klasszikus folyadék energiája két részből áll. A folyadék kinetikus energiáját a folyadék sebességeloszlása $\vec{v}(\vec{r})$ határozza meg:

$$T = \frac{m}{2} \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) (\vec{v}(\vec{r}))^2. \quad (1.32)$$

Ideális folyadék esetén a folyadék belső energiája csak a sűrűségtől függ. Kvantummechanikára áttérve, Landau feltételezte, hogy a rendszer Hamilton operátora a klasszikus energia kifejezésével megegyezően, a következő alakú:

$$H = \int d\vec{r} \left\{ m \frac{\vec{v}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) \vec{v}(\vec{r})}{2} + E[\rho(\vec{r})] \right\}. \quad (1.33)$$

A $\vec{v}(\vec{r})$ sebesség operátorát a sűrűség és az áram operátora a következőképpen határozza meg:

$$v = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{\rho} J + J \frac{1}{\rho} \right\}. \quad (1.34)$$

A sűrűség és a sebesség operátorainak a felcserélési relációi:

$$[\rho(\vec{r}), \sigma(\vec{r}')] = 0; [\rho(\vec{r}), v(\vec{r}')] = i \nabla \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (1.35a)$$

$$[\vec{v}(\vec{r})_i, \vec{v}(\vec{r}')_j] = -i \delta(\vec{r} - \vec{r}') \frac{1}{\rho(\vec{r})} (\text{rot } \vec{v}(\vec{r}))_k. \quad (1.35b)$$

Ha a folyadéknak csak az örvénymentes mozgásait vizsgáljuk ($\text{rot } \vec{v}(\vec{r}) = 0$), akkor létezik egy Φ sebességpotenciál, melyre $\vec{v}(\vec{r}) = \vec{\nabla} \Phi$ és így ρ és Φ 1.35 szerint egymás kanonikus konjugáltjai. Ezután feltételezve, hogy az egyensúlyi sebességeloszlás zérus és a sűrűség mindenütt az egyensúlyi sűrűség körül ingadozik, $\vec{v}(\vec{r})$ és $\delta \rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r}) - \rho_0$ kis mennyiségeknek tekinthetők. A Hamilton operátort ezen mennyiségek szerint sorbafejtve, a másodrendű tagok a szabad fonongerjesztéseket és a

magasabbrendű tagok ezen fonongerjesztések közötti kölcsönhatást írják le. Ez az elmélet a véges hőmérséklet esetére is kiterjeszthető, ha feltesszük, hogy a belső energia a sűrűségen kívül az entrópiától is függ. Ez a kvantum hidrodinamika adja az elméleti alapját a szuperfolyékony hélium ún. két folyadék elméletének.

A Landau-féle kvantum hidrodinamika nyilvánvalóan csak az atomok közötti távolságnál sokkal hosszabb hullámhosszú gerjesztések leírására alkalmas. A legfőbb hiányossága azonban abból áll, hogy nem ad számot arról, hogy mi a szerepe a Bose statisztikának és így ez a módszer elvileg a Fermi folyadékokra is alkalmazható lenne.

A következőkben ismertetjük egy kölcsönható Bose rendszer kollektív koordinátákkal történő leírását, amellyel *Sunakawa* [18] a Landau-féle kvantum hidrodinamika mikroszkopikus elmélettel való megalapozását adta.

Az előző fejezetben megmutattuk, hogy az egyrészecskés korrelációs függvény pólusai a sűrűség—sűrűség korrelációs függvényben is megjelennek és egy kölcsönható Bose rendszer „egyrészecskés” gerjesztései a sűrűség-fluktuációk. Emiatt célszerűnek látszik az egyrészecskés jelleg kihagyása a problémából és csak a sűrűség-fluktuációkat vizsgálni. A rendszer Hamilton operátora a kinetikus és a kölcsönhatási energia összege: $H = T + H_I$. A kölcsönhatási Hamilton operátort a következőképpen fejezhetjük ki a sűrűségoperátor segítségével:

$$H_I = \frac{1}{2} \int d\vec{r} d' (\varrho(\vec{r}) \varrho(\vec{r}') - \varrho(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r}')) v(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (1.36)$$

A kinetikus energia a téroperátorok deriváltjait tartalmazza:

$$T = \frac{1}{2m} \int \vec{\nabla} \psi^+ (\vec{r}) \vec{\nabla} \psi (\vec{r}) d\vec{r}. \quad (1.37)$$

Sunakawa [20] mutatta meg, hogy a $P = \psi^+ (\vec{r}) \frac{1}{\varrho(\vec{r})} \psi (\vec{r})$ projekciós operátor saját értéke Bose rendszer esetén csak 1 lehet, így egységoperátorként viselkedik. (Fermi rendszer esetén P -nek lehet zérus sajátértéke is.) Ilyen módon a kinetikus energia (1.37) a következő alakba írható:

$$T = \frac{1}{2m} \int \nabla \psi^+ (\vec{r}) \psi (\vec{r}) \frac{1}{\varrho(\vec{r})} \psi^+ (\vec{r}) \vec{\nabla} \psi (\vec{r}) d\vec{r}. \quad (1.38)$$

A sűrűség és az áram operátorának 1.3, 1.4-es kifejezéseit felhasználva a kinetikus energia a következő alakba írható:

$$T = \frac{1}{8m} \int d\vec{r} (\vec{\nabla} \varrho(\vec{r}) - 2im\vec{J}(\vec{r})) \frac{1}{\varrho(\vec{r})} (\vec{\nabla} \varrho(\vec{r}) + 2im\vec{J}(\vec{r})). \quad (1.39)$$

Ezzel a Hamilton operátorból az egyrészecskés jelleget kiküszöböltük. A sűrűség és az áram azonban egymásnak nem kanonikus konjugáltjai, ezért az áram operátora helyett vezessük be az 1.34 által adott sebesség operátort. A kinetikus energia 1.39-es kifejezésében a sűrűség operátorának inverze is szerepel, amelyet az egyensúlyi sűrűségtől való eltérés hatványai szerint haladó sorba fejthetünk. Fourier transzformáltakra áttérve — ha a folyadéknak csak az örvénymentes állapotaira korlátozó-

dunk ($\text{rot } \vec{v}(\vec{r})=0$) — a sűrűség és a sebesség operátorokat előállíthatjuk keltő és eltüntető operátorok lineáris kombinációjaként:

$$\varrho_k = d_k(B_k + B); \quad \vec{v}_k = \frac{\vec{k}}{2d_k}(B_{-k} - B_k^+). \quad (1.40)$$

A d_k együtthatót úgy állapítjuk meg, hogy a Hamilton operátor B_k operátorokban másodrendű tagja diagonális legyen. Így a Hamilton operátor másodrendű tagja a szabad gerjesztések energiáját határozza meg:

$$E_k^0 = \sqrt{\varepsilon_k \left(\frac{2NV_k}{\Omega} + \varepsilon_k \right)}. \quad (1.41)$$

Ez az energia kifejezés attól eltekintve, hogy a kondenzált állapotban lévő részecskék száma helyett a teljes részecskeszámot tartalmazza, megegyezik a Bogoljubov közelítésben kapott gerjesztési energia kifejezésével (1.31).

A Hamilton operátor B_k operátorokban harmad- és magasabb rendű tagjai ezen szabad gerjesztések közötti kölcsönhatást írják le. A kölcsönhatás leíró Hamilton operátornak végtelen sok tagja lesz, de ezek mátrixelemei $\sqrt{\varrho_k}/N$ hatványai szerint haladnak. Így a hosszú hullámhosszú gerjesztések vizsgálatához elegendő, ha a kölcsönhatási Hamilton operátor első — a B_k operátorokban harmadrendű — tagját tartjuk meg. Annak ellenére, hogy ez a módszer is elsősorban a hosszú hullámhosszú gerjesztések leírására alkalmas, megfelelően választott V_q modell potenciállal reprodukálható a szuperfolyékony hélium fonon-roton gerjesztési spektruma.

1.3. Korrelált bázis függvények módszere

A szuperfolyékony hélium elemi gerjesztéseinek számolására a leggyakrabban használt eljárás az ún. korrelált bázis függvények módszere, amely lényegében a Feynman-féle fenomenologikus fonon—roton modell [3] megalapozása.

Feynman a következőkből indult ki. Tegyük fel, hogy a hélium alapállapotú hullámfüggvénye Φ ismert. Ekkor, ahogy azt nagyon szép érvekkel bebizonyította, a rendszer alacsony energiájú gerjesztett állapotainak a hullámfüggvénye $\psi = \sum_i f(\vec{r}_i)\Phi$ alakú, ahol az i szerinti összegezést az összes atomra el kell végezni.

A gerjesztett állapot hullámfüggvényének az ismeretében a gerjesztett állapot energiája:

$$E_\psi = \frac{\langle \psi | H - E_0 | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (1.42)$$

ahol E_0 az alapállapot energiája. Az $f(\vec{r})$ függvény alakját Feynman variációszámítással határozta meg: $f(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}$. Ezzel a gerjesztési energiára következő kifejezést kapta:

$$E_k^F = \frac{k^2}{2mS(k)}, \quad (1.43)$$

ahol $S(\vec{k})$ a folyadék struktúra faktora (a $p(r)$ párkorrelációs függvény Fourier transzformáltja). A struktúra faktor kis k értékek esetén lineárisan indul, így a Feynman-féle gerjesztési energia jól leírja a fonogerjesztéseket (I. Függelék). A struktúra faktornak az első szomszédok távolságának megfelelő hullámszámnál $k_0 \approx \frac{2\pi}{a}$, maximuma van, ami a gerjesztési energiában (1.43) egy minimumnak felel meg. Nagy hullámszámoknál $S(k)$ egyhez tart, ennek megfelelően a Feynman-féle gerjesztési energiája a szabad hélium atomok energiájához közelít. A kísérleti adatokkal összehasonlítva, bár a Feynman-féle gerjesztési spektrumban megjelenik a roton gerjesztéseknek megfelelő minimum, a rotonok energiájára kapott 1,55 meV azonban több mint kétszerese a kísérletileg megfigyelt roton energiájának (0,743 meV). A szuperfolyékony hélium gerjesztett állapotainak Feynman-féle modelljét *Feynman* és *Cohen* [4] fejlesztette tovább a következő gondolatmenet alapján. A hélium atomok között kis távolságban egy nagyon erős tasztítás lép fel, ezért az atomok egymástól jól elkülönülten helyezkednek el. Szemeljük ki egy atomot a folyadékból. Ha ezt az atomot elkezdjük mozgatni, akkor energetikailag kedvezőbb, ha az előtte lévő atomok kitérnek előle és a mozgó atomot körülvevő atomok is elmozdulnak, hogy szabad utat engedjenek neki. Az a tény, hogy a mozgó atomot körülvevő atomok is mozgásba jönnek, a rendszer kinetikus energiáját növeli, de az atomok tasztító törzsei átlapolódásának elkerülésével nyert potenciális energia nyereség ezt jelentősen felülmúlhatja. Így a mozgó atom körül a folyadék mozgásba jön. A kialakuló áramlási képről feltették, hogy az a mozgó atomtól nagy távolságban dipól jellegű. (Klaszikus hidrodinamika szerint egy ideális folyadékban mozgó merev gömb maga körül egy dipól jellegű áramlási teret hoz létre.) Ezt a jelenséget, hogy egy mozgó atom körül a folyadék többi része mozgásba jön, „back-flow”-nak nevezik. A hélium atomok megkülönböztethetetlenek, ezért ez a back-flow csak akkor lesz jelentős, ha a gerjesztés hullámhossza összemérhető vagy rövidebb mint az atomok közötti átlagos távolság. Ennek alapján Feynman és Cohen a gerjesztett állapot hullámfüggvényére a következő alakot javasolták:

$$\psi_k = \sum_i e^{i\vec{k}\vec{r}_i} \left\{ 1 + i \sum_{j \neq i} A \frac{\vec{k}(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|^3} \right\} \Phi. \quad (1.44)$$

Ez a hullámfüggvény kis hullámszámok esetén a Feynman-féle gerjesztési energiát (1.43) adja vissza, mutatva, hogy a nagy hullámhosszak esetén a back-flow nem jelenik meg. A rotonok energiájára az 1.44-es hullámfüggvény 1,0 meV-et ad, ami lényegesen közelebb van a kísérleti értékhez mint az eredeti Feynman-féle gerjesztési energia.

Tekintettel arra, hogy a Feynman, illetve a Feynman—Cohen modell lényegében helyesen írja le a szuperfolyékony hélium gerjesztett állapotait, hasznosnak látszik ezt más szempontból is megvizsgálni.

A sűrűségoperátor alakja koordináta reprezentációban: $\varrho(\vec{r}) = \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$.

Ennek Fourier transzformáltja: $\varrho_k = \sum_i e^{i\vec{k}\vec{r}_i}$. Látható, hogy Feynman-féle gerjesztett állapot hullámfüggvénye a következő alakba írható: $\psi_k^E = \varrho_k^+ \Phi$, azaz a gerjesztett állapotban egy sűrűségfluktuáció van jelen. Mivel kis k értékek esetén a Feynman-féle gerjesztések energiája megegyezik a kísérletileg mért gerjesztési energiával,

ezért biztonsággal mondhatjuk, hogy a $k \rightarrow 0$ esetben a rendszer egyedüli alacsony energiás gerjesztései a hosszú hullámhosszú sűrűségfluktuációk, a fononok. A gerjesztett állapot Feynman—Cohen-féle hullámfüggvénye (1.44). A következő alakba írható:

$$\psi_{\vec{k}} = (q_{\vec{k}}^+ + \sum_{\vec{q} \neq \vec{k}} 4\pi A \frac{\vec{k}\vec{q}}{q^2} q_{\vec{q}}^+ q_{\vec{k}-\vec{q}}^+) \Phi. \quad (1.45)$$

A második, ún. back-flow tag az eredeti Feynman-féle gerjesztések közötti kölcsönhatást veszi figyelembe [27].

A Feynman-féle modell általánosítását Jackson és Feenberg [19, 23] végezte el. Ez az ún. korrelált bázis függvények módszere, amely röviden a következő:

Tegyük fel, hogy a szuperfolyékony hélium alapállapota $|\Phi\rangle$ ismert. Láttuk, hogy az egy sűrűségfluktuációt tartalmazó $q_{\vec{k}}^+ |\Phi\rangle$ állapot is jól közelíti a gerjesztett állapotot, ezért feltesszük, hogy az egy, két stb. sűrűségfluktuációt tartalmazó állapotok rendszere

$$\begin{aligned} |\vec{k}\rangle &= q_{\vec{k}}^+ |\Phi\rangle; \quad |\vec{k}_1; \vec{k}_2\rangle = q_{\vec{k}_1}^+ q_{\vec{k}_2}^+ |\Phi\rangle \\ |\vec{k}_1; \vec{k}_2; \vec{k}_3\rangle &= q_{\vec{k}_1}^+ q_{\vec{k}_2}^+ q_{\vec{k}_3}^+ |\Phi\rangle; \dots \end{aligned} \quad (1.46)$$

jó kiinduló bázis a gerjesztett állapot leírásához. Az 1.46-os állapotok azonban egyrészt nem normáltak, másrészt nem ortogonálisak. Az egy sűrűségfluktuációt tartalmazó állapotot egyszerűen normálhatjuk, mivel definíció szerint [24] $\langle \Phi | q_{\vec{k}} q_{\vec{k}}^+ | \Phi \rangle = NS(k)$, azaz a röntgenszórási kísérletekből ismert párkorrelációs függvény felhasználásával ez az állapot normálható. De például a két sűrűségfluktuációt tartalmazó állapot normálásához a négy részecskés korrelációs függvény ismerete volna szükséges. Ez a nehézség áthidalható az ún. konvolúciós közelítés segítségével [19], amely szerint a három- és több részecskés korrelációs függvények a párkorrelációs függvény segítségével közelíthetők. Így például:

$$(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 | \vec{k}_1; \vec{k}_2) \approx \sqrt{NS(\vec{k}_1 + \vec{k}_2) S(\vec{k}_1) S(\vec{k}_2)}. \quad (1.47)$$

Ezzel a közelítéssel a most már normált egy, két stb. sűrűségfluktuációt tartalmazó állapotok rendszerét a Schmidt-féle eljárással ortogonalizálhatjuk:

$$\begin{aligned} |\vec{k}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{NS(k)}} q_{\vec{k}}^+ |\Phi\rangle \\ |\vec{k}_1; \vec{k}_2\rangle &= \left(\frac{1}{N \sqrt{S(k_1) S(k_2)}} q_{\vec{k}_1}^+ q_{\vec{k}_2}^+ - \frac{1}{\sqrt{NS(\vec{k}_1 + \vec{k}_2)}} \right) |\Phi\rangle. \end{aligned} \quad (1.48)$$

Hasonló közelítéssel a Hamilton operátor mátrixelemeit is kiszámolhatjuk a fenti állapotok között, például:

$$\begin{aligned} \langle \vec{k} | H - E_0 | \vec{k} \rangle &= E_{\vec{k}}^E \\ \langle \vec{k} | H - E_0 | \vec{q}; \vec{k} - \vec{q} \rangle &= \frac{1}{2m} \{ \vec{k}\vec{q} S(\vec{k} - \vec{q}) + \vec{k}(\vec{k} - \vec{q}) S(\vec{q}) \}. \end{aligned} \quad (1.49)$$

Meg kell jegyezni, hogy az atomok közötti potenciál sehol sem jelenik meg, szerepét a folyadék struktúra faktora veszi át.

Ennek alapján egy Brillouen—Wiegner-féle perturbációs számítást végezve, a struktúra faktor ismeretében a gerjesztett állapotok energiája kiszámolható. Jackson és Fenberg [19, 23] Götze [25] feltételezték, hogy a három sűrűségfluktuációt tartalmazó állapotok járuléka elhanyagolható. Az általuk meghatározott gerjesztési spektrum elég jó egyezésben van a kísérleti adatokkal.

Magasabb rendű perturbációs számítás alkalmazásánál a legfőbb nehézséget az jelenti, hogy nagy ($k > 30 \text{ nm}^{-1}$) hullámszámok esetén $S(k)$ értéke már csak nagyon pontatlanul ismert.

Annak ellenére, hogy a korrelált bázis függvények módszerével meghatározott gerjesztési spektrum jó egyezésben van a kísérleti adatokkal, a módszer gyenge pontja a konvolúciós közelítés, vagyis, hogy a többreszecske korrelációs függvényeket a párkorrelációs függvény segítségével közelíti. Amíg klasszikus folyadékok esetén ez a közelítés jogosnak mondható, addig egy olyan kvantum folyadéknál, mint a szuperfolyékony hélium, ennek a közelítésnek a jogossága erősen kérdéses. A szuperfolyékony hélium alapállapotában az atomok nagy zérusponti mozgása ellenére az atomok merev taszító törzseinek következtében valószínű, hogy az atomok között egy nagyon erős közeli rend áll fenn. Ilyen módon, annak ellenére, hogy a korrelált bázis függvények módszere helyesen írja le a szuperfolyékony hélium alacsonyan fekvő gerjesztett állapotait, kérdéses, hogy a magasabb energiájú gerjesztett állapotokat — elsősorban a minket érdeklő két rotont tartalmazó állapotokat — képes-e helyesen leírni.

II. MODELL AZ ELEMİ GERJESZTÉSEK KÖZÖTTI KÖLCSÖNHATÁSOK VIZSGÁLATÁRA

Amint azt az előző fejezetben láttuk, egy kölcsönható Bose rendszer elemi gerjesztéseit mikroszkopikus elméletből kiindulva csak a gyenge kölcsönhatás határesetében tudjuk megadni. A reális szuperfolyékony hélium alapállapota lényegesen különbözik egy kölcsön nem ható rendszer alapállapotától. Ez világosan látszik abból a tényből, hogy amíg egy kölcsön nem ható rendszer alapállapotában minden atom a kondenzált állapotban van, addig a hélium alapállapotában az atomoknak kevesebb mint 10%-a található a kondenzátumban (a mérések szerint 1,1 K hőmérsékleten az atomoknak mindössze $6,9 \pm 0,8\%$ -a van kondenzált állapotban [26]). A szabad rendszerből kiinduló perturbációs számításnál a perturbációs sor lényegében $\frac{N-N_0}{N}$ hatványai szerint halad, ami reménytelenné teszi azt, hogy a szabad rendszerből kiindulva a reális héliumhoz eljussunk. Mivel nem célunk magának a fonon—roton gerjesztési spektrumnak a kiszámolása, csupán a két rotont tartalmazó állapotok tanulmányozását tűztük ki célul, ezért egy, bár mikroszkopikus elméleten alapuló, de mégis fenomenologikus modell alapján fogjuk vizsgálatainkat elvégezni. A modell azon alapul, hogy a szuperfolyékony hélium fonon—roton gerjesztéseinek az élettartama az energiájukhoz viszonyítva nagyon hosszú. Ilyen módon a fonon—roton gerjesztések egymással csak gyengén kölcsönható kvázirészecskének tekinthetők, amelyek élettartamát csak az egymással való ütközésük teszi végeggé. A szuperfolyékony hélium két folyadék elméletében ezen kvázirészecskék alkotják a normál folyadékot. A II.1. fejezetben — részben Kondor és Szépfalussy munkájára

[9] támaszkodva — megmutatjuk, hogy egy kölcsönható Bose rendszer korrelációs függvényeit hogyan lehet kvázirészecske korrelációs függvények segítségével közelíteni. A II.2. fejezetben megvizsgáljuk, hogy a két- vagy több kvázirészecskét tartalmazó állapotok milyen járulékot adnak a dinamikus struktúra faktorhoz. Megmutatjuk, hogy a sűrűség—sűrűség korrelációs függvény egy kvázirészecske közbenső állapotot tartalmazó és proper (egy kvázirészecske közbensőállapotot nem tartalmazó) járulékai között erős kioltás lép fel. Ennek következtében a dinamikus struktúra faktort célszerűbb az áram—áram korrelációs függvényből számolni.

A II.3. fejezetben röviden áttekintjük a szuperfolyékony hélium alapállapotának főbb jellemzőit. A II.4. fejezetben megadjuk azt a kölcsönhatási Hamilton operátort, amellyel a továbbiakban a rotonok közötti kölcsönhatás és a két rotonot tartalmazó állapotoknak az egy kvázirészecskét tartalmazó állapotokkal való kölcsönhatás következményeit fogjuk vizsgálni.

II.1. Egy kölcsönható Bose rendszer gerjesztett állapotainak leírása kvázirészecskék segítségével

Amint azt az I. fejezetben megmutattuk, az egyrészecskés Green-függvény pólusai a sűrűség—sűrűség korrelációs függvényben is megjelennek. A szuperfolyékony héliumon végzett neutronszórási kísérletek adatai alapján tudjuk, hogy a sűrűség—sűrűség korrelációs függvény alacsony energiáknál lévő pólusainak megfelelő fonon—roton gerjesztések élettartama az energiájukhoz viszonyítva nagyon hosszú [13]. Ilyen módon ezeknek a gerjesztéseknek valamilyen — jól definiált kvázirészecskéket feleltethetünk meg, amelyek egymással már csak gyengén hatnak kölcsön. Ezekhez a kvázirészecskékhez hozzárendelhetünk valamilyen b_k kvázirészecske keltő és eltüntető operátorokat olyan módon, hogy mivel az alapállapot nem tartalmaz kvázirészecskéket, a $b_k|\Phi\rangle=0$ feltétel teljesüljön. Ilyen módon a kvázirészecskék Green-függvényét

$$G_{\alpha\beta}(\vec{k}; t) = -i\langle T\{b_k^\alpha(t)b_k^{\beta\dagger}(0)\} \rangle \quad (2.1)$$

bevezetve feltesszük, hogy az anomális Green-függvények zérus hőmérsékleten eltűnnek:

$$G_{+-} = G_{-+} = 0. \quad (2.2)$$

Feltételezésünk szerint ezek a kvázirészecskék csak gyengén hatnak kölcsön, ezért ezt a kölcsönhatást perturbációszámítással kívánjuk figyelembe venni. E célból a rendszer Hamilton operátorát két részre bontjuk. (Az alapállapot energiát az egyszerűség kedvéért elhagyjuk.)

$$H = H_0 + H_I. \quad (2.3)$$

A szabad kvázirészecskék Hamilton operátora:

$$H_0 = \sum E_k^0 b_k^\dagger b_k, \quad (2.4)$$

ahol E_k^0 a kölcsön nem ható kvázirészecskék energiája. A H_0 alapállapotáról feltesszük, hogy arra szintén teljesül a $b_k|\Phi_0\rangle=0$ feltétel, ahol $|\Phi_0\rangle$ a H_0 alapállapota.

A szabad kvázirészecskék Green-függvényének Fourier transzformáltja a következő alakú:

$$G_{\alpha}^{(0)} \equiv G_{\alpha\alpha}^{(0)} = \frac{1}{\alpha\omega - E_k^0}. \quad (2.5)$$

A kölcsönható rendszer Green-függvényére a következő Dyson egyenletet írhatjuk fel:

$$G_{\alpha} = G_{\alpha}^{(0)} + G_{\alpha}^{(0)} M_{\alpha} G_{\alpha}, \quad (2.6)$$

ahol a bevezetett M_{α} sajátenergiát a következőképpen bonthatjuk fel: $M_{\alpha} = m + \alpha\omega m'$, ahol m és m' mind k -nak, mind ω -nak páros függvénye. Így a teljes Green-függvény a sajátenergiákkal kifejezve a következő alakú:

$$G_{\alpha}(k; \omega) = \frac{1}{\alpha\omega(1-m') - E_k^0 - m}. \quad (2.7)$$

Ahhoz, hogy a két rotont tartalmazó állapotoknak a sűrűség—sűrűség korrelációs függvényre való hatását megvizsgáljuk, a sűrűség—sűrűség korrelációs függvényt ki kell fejeznünk a kvázirészecske operátorok segítségével. Ezért tegyük fel, hogy az a_k^z hélium atom keltő és eltüntető operátorok és a b_k^z kvázirészecske keltő operátorok között a következő kapcsolat van:

$$a_k^z = u_k b_k^z - v_k b_{k'}^{\beta+}, \quad (2.8)$$

ahol $u_k^2 - v_k^2 = 1$ és így a b_k^z operátorok felcserélési relációja:

$$[b_{k'}^z, b_k^{\beta+}] = \alpha \delta_{\alpha\beta} \delta_{kk'}. \quad (2.9)$$

Ez formailag a Bogoljubov transzformációval egyezik meg. A Bogoljubov közelítés-nél az u_k és v_k együtthatókat abból a feltételből határozzuk meg, hogy a Hamilton operátornak a b_k operátorokban másodrendű tagjai közül csak a $b_k^+ b_k$ együtthatója legyen zérustól különböző. Most az együtthatókat az a feltétel határozza meg, hogy az anomális Green-függvény eltűnjön (2.2). Ezzel a transzformációval összehasonlíthatjuk az 1.11 által definiált egyrészecskés (hélium atom) $G_{\alpha\beta}$ Green-függvényt a kvázirészecskék Green-függvényével (2.1) 1.11 és 2.1 összehasonlítás alapján az anomális kvázirészecske Green-függvény eltűnésének feltétele:

$$\frac{2u_k v_k}{u_k^2 + v_k^2} = -\frac{\Sigma_2}{\varepsilon_k - \mu + \Sigma_1}. \quad (2.10)$$

A 2.10 egyenlet jobb oldalán levő sajátenergiák az energiától is függenek. Az a feltétel, hogy a jobb oldal energiafüggetlen legyen a Bogoljubov közelítésben teljesül, de általános esetben az a feltétel valószínűleg nem teljesül. Ez persze korántsem meglepő. A meglepő inkább az lenne, ha az a_k és a b_k operátorokat ilyen egyszerű, a 2.8 által adott transzformáció kötné össze. Ennek ellenére tegyük fel, hogy 2.10 jobb oldala energiafüggetlen, vagy legalábbis az energiahéj környezetében gyengén függ az energiától.

Vezessük be a sűrűség-kvázirészecske, illetve az áram kvázirészecske korrelációs függvényeket:

$$C_\alpha(k; t) = -\langle T \{ \rho_k(t) b_k^{\alpha+}(0) \} \rangle \quad (2.11)$$

$$C_\alpha^i(k; t) = -i \langle T \{ J_k^i(t) b_k^{\alpha+}(0) \} \rangle. \quad (2.12)$$

A kontinuitási egyenlet felhasználásával a következő összefüggést kapjuk C_α és C_α^z között (a z tengely irányát ismét a \vec{k} -val párhuzamosan véve fel):

$$\omega C_\alpha - k C_\alpha^z = \alpha \sqrt{N_0} (u_k + v_k). \quad (2.13)$$

Hasonló módon mint 1.21-ben a C_α és a C_α^i korrelációs függvényekből is leválasztunk egy kvázirészecske Green-függvényt:

$$C_\alpha = \bar{A}_\alpha G_\alpha \quad \text{és} \quad C_\alpha^i = \bar{A}_\alpha^i G_\alpha. \quad (2.14)$$

A sűrűség-kvázirészecske, illetve az áram kvázirészecske vertexeket a következő alakúnak vehetjük fel:

$$\bar{A}_\alpha = \sqrt{N_0} (u_k + v_k) \{1 + \bar{\lambda} + \alpha \omega \bar{\lambda}'\} \quad (2.15a)$$

$$\bar{A}_\alpha^z = \sqrt{N_0} \frac{k}{2m} (u_k - v_k) \{ \omega \bar{\lambda}_z + \alpha (1 + \bar{\lambda}_z') \}, \quad (2.15b)$$

ahol $\bar{\lambda}$, $\bar{\lambda}'$, $\bar{\lambda}_z$ és $\bar{\lambda}_z'$ mind ω -ban, mind k -ban páros függvények. Ha a szabad kvázirészecskék energiáját a következőképpen választjuk meg:

$$E_k^0 = \varepsilon_k (u_k - v_k)^2, \quad (2.16)$$

akkor a sajátenergia és a vertexek között a következő összefüggéseket kapjuk:

$$m' = E_k^0 \bar{\lambda}_z' - \bar{\lambda} \quad (2.17a)$$

$$m = E_k^0 \bar{\lambda}_z' - \omega^2 \bar{\lambda}'. \quad (2.17b)$$

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$d_\alpha = 1 + \bar{\lambda} + \alpha \omega \bar{\lambda}' \quad (2.18a)$$

$$d_{J_\alpha} = \omega \bar{\lambda}_z + \alpha (1 + \bar{\lambda}_z'). \quad (2.18b)$$

Ekkor a kvázirészecskék Green-függvényét a következő formába írhatjuk:

$$G_\alpha = \frac{1}{\alpha \omega d_\alpha - E_k^0 d_{J_\alpha}}. \quad (2.19)$$

A sűrűség—sűrűség korrelációs függvényből 1.24-hez hasonlóan leválaszthatjuk az egy kvázirészecske közbenső állapotot tartalmazó részeket:

$$F = F^r + \bar{A}_\alpha G_\alpha \bar{A}_\alpha, \quad (2.20)$$

ahol az F^r proper sűrűség—sűrűség korrelációs függvény azon diagrammok összege, amelyek nem tartalmaznak egy kvázirészecskés közbenső állapotot.

Felhasználva a \bar{A} vertex 2.15 által adott felbontását, a sűrűség—sűrűség korrelációs függvény proper mennyiségek segítségével a következő alakba írható:

$$F = F^r + N_0 \frac{\varepsilon_k}{E_k^0} (d_+^2 G_+ + d_-^2 G_-). \quad (2.21)$$

Hasonló módon a longitudinális áram—áram korrelációs függvényre, illetve a sűrűség—áram korrelációs függvényre a következő kifejezéseket kapjuk:

$$F_L = F_L^r + N_0 \frac{E_k^0}{2m} (d_+^2 G_+ + d_-^2 G_-) \quad (2.22a)$$

$$F_z = F_z^r + N_0 \frac{k}{2m} (d_+ d_{J+} G_+ + d_- d_{J-} G_-). \quad (2.22b)$$

Vizsgáljuk meg először a G_+ kvázirészecske Green-függvényt. Ennek pólusát, vagyis a kvázirészecske gerjesztési spektrumot az $\omega d_+ = E_k^0 d_{J+}$ egyenlet határozza meg. Mivel definíció szerint d_+ és d_J nem tartalmaz egy gerjesztéses közbenső állapotot, ezért távol a több részecskes állapotok energiájától, ezek lassan változó függvények, így a kvázirészecskék energiája — a rendszer elemi gerjesztéseinek az energiája — a következő alakba írható:

$$E_k = E_k^0 \frac{d_{J+}}{d_+} \Big|_{\omega=E_k}. \quad (2.23)$$

Így az elemi gerjesztési spektrum környékén, távol a több gerjesztést tartalmazó állapotok energiájától — G_+ a következő alakba írható:

$$G_+(p) = \frac{Z_1(k)}{\omega - E_k}, \quad (2.24)$$

ahol

$$Z_1(k) = \frac{1}{d_+ \left(1 - E_k \frac{\partial}{\partial \omega} \ln \frac{d_{J+}}{d_+} \right)_{\omega=E_k}} \quad (2.25)$$

adja meg a pólus erősségét. A továbbiakban az egy gerjesztést leíró Green-függvényt mindig ezen ún. pólusközelítéssel alakokkal fogjuk helyettesíteni. A pólus erősségét leíró $Z_1(k)$ faktort paraméterként fogjuk kezelni.

II.2. A több gerjesztést tartalmazó állapotok megjelenése a dinamikus struktúra faktorban

A szuperfolyékony hélium gerjesztett állapotairól a neutronszerelési kísérletek adataiból nyerhetjük a legtöbb információt. Lassú neutronok inelasztikus szórásával a rendszer dinamikus struktúra faktora $S(\vec{k}, \omega)$ mérhető meg (Függelék). $T=0$ hőmérsékleten $\omega > 0$ energiák esetén $S(\vec{k}; \omega)$ a sűrűség—sűrűség korrelációs függ-

vény ismeretében a következőképpen kapható meg (F3):

$$S(\vec{k}; \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} F(\vec{k}; \omega) \quad (2.26)$$

$F(\vec{k}; \omega)$ 2.20-as felbontását felhasználva:

$$S(\vec{k}; \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \{F^r + \bar{A}_\alpha G_\alpha \bar{A}_\alpha\}. \quad (2.27)$$

Az F^r proper sűrűség—sűrűség korrelációs függvény és a \bar{A}_α sűrűség-kvázirészecske vertexek definíció szerint nem tartalmaznak egy kvázirészecskés közbenső állapotot, ezért ezek csak a két vagy több gerjesztést tartalmazó állapotok energiájánál adnak $S(\vec{k}, \omega)$ -hoz járulékot. A G_α kvázirészecske Green-függvény két típusú járulékot ad $S(\vec{k}, \omega)$ -hoz. G_α -ban egyrészt megjelennek a rendszer elemi gerjesztései (2.24), másrészt G_α az M sajátenergián keresztül (2.7) a több gerjesztést tartalmazó állapotok energiájánál is ad $S(\vec{k}; \omega)$ -hoz járulékot. Ha az egy gerjesztést tartalmazó állapot energiája E_k (2.23) távol van a több gerjesztést tartalmazó állapotok energiájától, akkor F^r szerint $S(\vec{k}; \omega)$ -ból leválasztható az egy gerjesztéses állapotok járuléka:

$$S(\vec{k}; \omega) = NZ(k)\delta(\omega - E_k) + S^{\text{II}}(\vec{k}; \omega). \quad (2.28)$$

A 2.21, 2.24 és 2.25-ös összefüggéseket felhasználva, az egy gerjesztést tartalmazó állapotok a következő súllyal jelennek meg $S(k; \omega)$ -ban:

$$Z(k) = \frac{N_0}{N} \frac{\varepsilon_k}{E_k} \frac{d_{J+}}{\left(1 - E_k \frac{\partial}{\partial \omega} \ln \frac{d_{J+}}{d_+}\right)_{\omega=E_k}}. \quad (2.29)$$

Ahhoz, hogy $Z(k)$ -nak a $k \rightarrow 0$ határesetben való viselkedését megvizsgáljuk, először is az 1.26-os összefüggéshez hasonló összefüggéseket vezethetünk le a proper korrelációs függvények között:

$$\omega(F^r + 2N_0(u_k + v_k)^2 \bar{\lambda}') = kF_z^r \quad (2.30a)$$

$$\omega^2(F^r + 2N_0(u_k + v_k)^2 \bar{\lambda}') = k^2 \left(\frac{N}{m} + F_L^r - \frac{N_0}{m} (1 + \bar{\lambda}_z') \right). \quad (2.30b)$$

A 2.30b összefüggésből látható, hogy kis k hullámszámok esetén az $\omega=0$ határesetben — felhasználva azt, hogy a proper áram—áram korrelációs függvény kis hullámszámok esetén k^2 -vel arányos — $\lim_{k \rightarrow 0} (1 + \bar{\lambda}_z') = \frac{N}{N_0}$. d_{J+} 2.18b definícióját felhasználva, 2.29-ből kis k értékek esetén a következőt kapjuk:

$$Z(k) = \frac{\varepsilon_k}{E_k} = \frac{k}{2mc}, \quad (2.31)$$

ahol felhasználtuk, hogy a gerjesztési spektrum lineárisan kezdődik: $E_k = ck$. Látható, hogy $Z(k)$ értékére kis hullámszámok esetén az egzakt kifejezést (F8) kapjuk vissza.

Érdemes megemlíteni, hogy mivel minden proper mennyiség az $\omega \rightarrow \infty$ határesetben $\frac{1}{\omega^2}$ -el arányos, így 2.18, 2.23 és a 2.29-es kifejezések összehasonlításából látható, hogy a nagy hullámok tartományában $Z(k) \rightarrow \frac{N_0}{N}$, ahogy azt Miller, Pines és Nozieres [27] általános érvek alapján megjósolta.

Ahhoz, hogy a több gerjesztést tartalmazó állapotok járulékát $S(\vec{k}; \omega)$ -hoz megbecsüljük, fejezzük ki a sűrűségoperátort a b_k^\pm kvázirészecske operátorok segítségével. Felhasználva a 2.8-as kifejezést, a sűrűség—operátor a következő alakba írható:

$$q_k = \sqrt{N_0} (u_k + v_k)(b_k + b_{-k}^\pm) + \sum_{\substack{q \neq b \\ 0 \neq k}} \frac{u_q v_{k-q} + v_q u_{k-q}}{2} (b_q b_{k-q} + b_{-q}^\pm b_{q-k}^\pm), \quad (2.32)$$

ahol, mivel a feltevésünk szerint az alapállapot nem tartalmaz kvázirészecske gerjesztést, a $b_q^\pm b_{k-q}$ típusú tagokat elhagytuk. Ilyen módon a proper sűrűség—sűrűség korrelációs függvényhez a legalacsonyabb rendű járulék a következő:

$$\delta F^r(k; t) = i \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{(u_q v_{k-q} + v_q u_{k-q})^2}{2}, \quad (2.33)$$

$$\{G_+(q; t)G_+(\vec{k}-\vec{q}; t) + G_-(q; t)G_-(\vec{k}-\vec{q}; t)\}.$$

Az idő szerinti Fourier transzformálta való áttérés után a G_α kvázirészecske Green-függvényt a 2.14-es pólsközelítéses alakjával helyettesíthetjük. Az energia szerinti integrálás elvégzése után 2.33 a következő járulékot adja $S(k; \omega)$ -hoz:

$$\delta S^{\text{II}}(k; \omega) = \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{(u_q v_{k-q} + v_q u_{k-q})^2}{2} Z_1(q) Z_1(\vec{k}-\vec{q}) \delta(\omega - E_q - E_{k-q}). \quad (2.34)$$

Ahogy az könnyen látható, az $\omega \neq 0$ esetén a $k \rightarrow 0$ határesetben 2.34 egy véges értékhez tart. Ugyanakkor tudjuk, hogy $k \rightarrow 0$ esetén a több gerjesztést tartalmazó állapotok $S(\vec{k}; \omega)$ -hoz k^4 szerint eltűnő járulékot adnak (F9). Ennek az ellentmondásnak az oka azonnal látható a 2.30b összefüggésből. $k \rightarrow 0$ esetén 2.30b jobb oldala zérushoz tart, míg a bal oldalon F^r és $2N_0(u_k + v_k)^2 \bar{\lambda}'$ külön-külön véges értékhez tartanak és csak az összegük tart zérushoz. Ez azt jelenti, hogy a sűrűség—sűrűség korrelációs függvény egy kvázirészecske közbenső állapotot tartalmazó és proper részeit nem lehet egymástól függetlenül tárgyalni. Még az energiahéjtól távoli energiák esetén is (ahol az egy kvázirészecskét tartalmazó állapot energiája messze van a két vagy több gerjesztést tartalmazó állapot energiájától) nagyon erős kioltás lép fel a sűrűség—sűrűség korrelációs függvény proper és nem proper részei között. Ennek következtében, ha a dinamikus struktúra faktor a sűrűség—sűrűség korrelációs függvényből akarjuk kiszámolni, csak akkor kaphatunk helyes eredményt, ha az F^r proper sűrűség—sűrűség korrelációs függvényt és az $\bar{\lambda}_x$ sűrűség—kvázirészecske vertexet egyidejűleg — a perturbációszámítás ugyanolyan rendjében — számoljuk ki. Egy ilyen számolás egy gyengén kölcsönható Bose rendszer esetén elvégezhető. A gyenge kölcsönhatás határesetében azonban rotongerjesztések még nem jelennek meg, ilyen módon a kétrotonos állapotoknak a dinamikus struktúra faktorban való megjelenésének a kiszámolására ez a módszer nem alkalmazható. A következőkben

megmutatjuk, hogy a több gerjesztést tartalmazó állapotoknak a dinamikus struktúra faktorban való megjelenésének vizsgálatához a sűrűség—sűrűség korrelációs függvény helyett célszerűbb az áram—áram korrelációs függvényből kiindulni.

A dinamikus struktúra faktort, felhasználva az áram—áram korrelációs függvény és a sűrűség—sűrűség korrelációs függvény közötti kapcsolatot (1.10b), az áram—áram korrelációs függvényből a következőképpen kaphatjuk meg:

$$S(k; \omega) = -\frac{1}{\pi} \frac{k^2}{\omega^2} \operatorname{Im} F_L(k; \omega). \quad (2.35)$$

A longitudinális áram—áram korrelációs függvény a 2.22a szerinti proper és nem proper részekre való felbontását felhasználva:

$$S(k; \omega) = -\frac{1}{\pi} \frac{k^2}{\omega^2} \operatorname{Im} \left\{ F_L^r + \frac{N_0}{2m} E_k^0 d_J^2 G_+ \right\}. \quad (2.36)$$

Az áram operátorának mátrixelemei, mivel az alapállapotban nem folyik áram, k -val arányosak. Ezért a proper áram—áram korrelációs függvény $F_L^r \propto k^2$. Ennek következtében, ahogy az 2.36-ból látható, $\omega \neq 0$ esetén az áram—áram korrelációs függvény proper részéből $S(k; \omega)$ -hoz adódó járuléka k^4 -el lesz arányos. Mivel tudjuk, hogy a több gerjesztést tartalmazó állapotoknak k^4 -el arányos járulékot kell adniuk $S(k; \omega)$ -hoz (F9) ezért, bár 2.36 második tagja is ad k^4 -el arányos járulékokat, feltételezhető, hogy az áram—áram korrelációs függvény proper és nem proper részei, ha az egy gerjesztést tartalmazó állapot energiája távol van a két gerjesztést (elsősorban két roton) tartalmazó állapotok energiájától, egymástól függetlenül becsülhetőek és nem áll fenn közöttük olyan erős kioltás, mint a sűrűség—sűrűség korrelációs függvény proper és nem proper részei között. A két roton tartalmazó állapotoknak a dinamikus struktúra faktorban való megjelenését az V. fejezetben fogjuk részletesen megvizsgálni.

II.3. A szuperfolyékony hélium alapállapotának néhány jellemzője

Mint láttuk a II.1. fejezetben fenomenologikus módon bevezetett kvázirészecskék segítségével jól közelíthetőek egy kölcsönható Bose rendszer gerjesztett állapotai. Mielőtt ezen kvázirészecskék közötti kölcsönhatásra valamilyen modellt állítanánk fel, vizsgáljuk meg a szuperfolyékony hélium alapállapotát.

A szuperfolyékony hélium alapállapota főbb jellemzőinek megértése segítséget nyújthat ahhoz, hogy az elemi gerjesztésekről, elsősorban a hélium speciális gerjesztett állapotáról, a rotonokról képet alkothassunk magunknak. Bár az alapállapot — az alapállapot hullámfüggvénye — kiszámolására számos próbálkozás történt [21, 28], de erős közelítő jellegük következtében kevésbé alkalmasak az alapállapot megértésére, mint az alábbiakban tárgyalt, klasszikus mechanikán alapuló kép. Két hélium atom közötti potenciál elég jól ismert. Kis távolságoknál a nehezen polarizálható elektronfelhők átfedése miatt egy nagyon erős taszítás lép fel. Az ennek megfelelő merev gömbnek a sugara kb. 0,134 nm. Nagy távolságoknál a potenciál vonzó és jól közelíthető egy Lénárd—Jones 6—12 típusú Van der Waals potenciállal. A potenciál minimuma 0,3 nm körül van, a potenciálvölgy mélysége nagyon kicsi

(kb. 0,9 meV). Mivel a kis atomi tömeg miatt a zéruspont energia nagy, ezért még zérus hőmérsékleten sem alakul ki szilárd struktúra. Az alapállapotú hullámfüggvényről tudjuk, hogy a taszító törzsek miatt az atomok egymástól jól elkülönülten helyezkednek el. Elfeledkezve a zéruspont mozgásról, megpróbálhatjuk kiszámolni, hogy az atomok egy adott konfigurációja (rácsszerkezete) mellett mekkora a potenciális energia.

A folyadékon végzett röntgenszórási kísérletek egy diffrakciós csúcsot mutatnak, jelezve, hogy az első szomszédok közötti átlagos távolság 0,316 nm. Ismerve az első szomszédok átlagos távolságát, a rendszer sűrűségét — az atomi térfogat 0,0458 nm³ — ezeket rögzítettnek tételezve fel, a lehetséges konfigurációk közül nyilván az fog a valósághoz közel állni, amelynél a rendszer potenciális energiája közel van az adott struktúra energia minimumához, azaz ha minden atom a potenciális energia minimumához közel helyezkedik el. Egy ilyen struktúra a *Keesom* és *Taconis* által javasolt T_2^2 struktúra [29]. Képzeljünk el egy lapcentrált köbös rácsot, amely kétszer olyan sűrű, mint a folyadék sűrűsége. Ezután vegyük ki minden második atomot úgy, hogy minden atomot hat betöltött rácshely és hat üres rácshely vegyen körül. Ennek a T_2^2 struktúrának a legfőbb jellemzője az, hogy nyitott és ezzel az atomok nagy mozgékonyágát teszi lehetővé. Mind a HeI, mind a HeII viszkozitása hőmérséklet növelésével nő, hasonlóan a gázok viszkozitásához, ellentétben a normális folyadékok viszkozitásának hőmérsékletfüggésével [1]. Meg kell jegyezni, hogy a T_2^2 struktúrában, ha egy atom egy üres rácshelyre kerül, akkor ott a potenciális energiája kisebb lesz kb. 15%-kal. Ennek az az oka, hogy az üres helyre került atomok a betöltött helyükhöz képest hattal több második szomszéda van.

Természetesen teljesen nyilvánvaló, hogy ha az atomok zérusponti mozgását is figyelembe vesszük, akkor az mindenféle „rács struktúrát” teljesen elken. Meg kell jegyezni, hogy ez a struktúra éppen a nyitottsága következtében nem lokalizálja az atomokat a szomszédai által meghatározott „dobozba”, hanem az atomok nagyon könnyen diffundálnak, „elkenődnek”. Ez a lehetőség a zártabb struktúrákkal ellentétben csökkenti a zérusponti mozgásból származó kinetikus energiát. Egy ilyen nyílt struktúra esetén nem lehetetlen azt elképzelni, hogy mivel a kondenzátum aránya kb. 6,9%-os 1,1 K-on [26], azaz az alapállapotú hullámfüggvény amplitúdójának kb. 25%-a a kondenzált állapotot írja le. Annak ellenére, hogy a nagy zérusponti mozgás szétzilál mindenféle kristályszerű struktúrát, azt mondhatjuk, hogy egy atomot átlagosan hat első szomszéd veszi körül.

A rendszer gerjesztett állapotairól a következőket lehet mondani. Ha a gerjesztésnek megfelelő de Broglie hullámhossz jóval kisebb, mint az átlagos atomi távolság, akkor a gerjesztés részecske jellegű lesz, azaz nagy hullámszámoknál a szabad hélium atom gerjesztéséhez közeli energiájú lesz a gerjesztett állapot. Ha a de Broglie hullámhossz jóval nagyobb, mint az átlagos atomi távolság, akkor a gerjesztett állapot kollektív gerjesztés lesz, kis hullámszámok esetén sűrűség-fluktuációk lesznek a legalacsonyabb energiájú gerjesztett állapotok. Ha a gerjesztés hullámhossza összemérhető az atomi távolsággal, akkor a gerjesztésnek egyrészt részecske, másrészt kollektív jellege lesz. A szuperfolyékony hélium sajátos roton gerjesztései éppen az első szomszéd távolságnak megfelelő hullámszám körül vannak. Az előbbieken leírt T_2^2 struktúrából kiindulva a Feynman által adott roton képet talán jobban meg lehet érteni. Ha egy atom egy rácshelyről egy lyukhelyre ugrik, akkor ugyan a potenciális energiája kisebb lesz, de a nagyobb bezártsága miatt a kinetikus energiája növekszik. Elképzelhető, hogy a szomszédai kicsit átrendeződve még jobban csök-

kentik a potenciális energiáját és ezzel ennek a gerjesztett állapotnak az energiája csökken. A szomszédos atomok átrendeződésével ennek az állapotnak az élettartama hosszú lesz (az eredeti „rácshelye” megszűnt), másrészt egy ilyen gerjesztett állapot a sűrűséget növeli, egyezésben azzal a meglepő kísérleti ténnyel, hogy a hőmérséklet növekedésével a folyadék sűrűsége a termikusan gerjesztett rotonok számával arányosan növekszik [30]. Egy másik lehetőség, hogy egy atom egy rácshely és egy üres rácshely között oszcillál, azaz $1/2$ valószínűséggel van mindkét helyen, ekkor a szomszédos atomok átrendeződven egy dobozba zárják. Erről ugyanaz mondható el, mint az előbbi képről. Visszatérve az ilyen típusú gerjesztés egyrészecske, illetve kollektív jellegéhez. Nyilvánvaló, hogy például a betöltött és egy betöltetlen rácshely közötti kvantum diffúzió egyrészecske jellegű még akkor is, ha közben bármelyik szomszédja — megkülönböztethetetlen atomokról van szó — átveszi is a helyét. Ugyanakkor a szomszédok kis átrendeződése akkor jár kis energiával, ha az új konfiguráció kialakulásában sok atom vesz részt, mindegyik csak keveset mozdulva el az eredeti „helyéről”, így ez kollektív típusú viselkedésnek felel meg. Ez a kollektív viselkedés leírható nagy hullámhosszú sűrűségfluktuációkkal és ez felelhet meg a Feynman és Cohen által bevezetett „back-flow”-nak. Természetesen a rotonra egyéb modellek is felállíthatóak, például két szomszédos atom kvantum diffúzióval egymás helyére ugrik stb., de a különbözõ roton modellek legnagyobb hiányossága az, hogy nem képesek számot adni arról a tényről, hogy egy roton gerjesztés megjelenése növeli a folyadék sűrűségét, illetve növelve a folyadék sűrűségét (nagyobb nyomáson) a rotonok energiája csökken.

II.4. A szuperfolyékony hélium elemi gerjesztései közötti kölcsönhatások

A szuperfolyékony hélium elemi gerjesztései közötti kölcsönhatásokat tekintve a fononok közötti kölcsönhatás hasonló a szilárd anyagokban levő fonon—fonon kölcsönhatáshoz. A fonon—roton kölcsönhatásról annyit tudunk, hogy a rotonok energiája a folyadék sűrűségének növelésével csökken, tehát a fonon—roton kölcsönhatást jellemző csatolás negatív.

A Feynman kép alapján a rotonok maguk körül egy áramlási teret hoznak létre, amely nagy távolságban dipól jellegű. Ennek alapján várható, hogy a rotonok közötti kölcsönhatás egy — és valószínűleg legnagyobb — részét ezen dipólterek közötti kölcsönhatás adja. Ez úgy is megfogalmazható, hogy a roton—roton kölcsönhatás legnagyobb része a részecske jellegű „csupasz” rotonokat körülvevő hosszú hullámhosszú gerjesztések kicserélődéséből származik. Ezzel kapcsolatban azonban két kérdés merül fel. Későbbiekben (III. fejezet) megmutatjuk, hogy a rotonok közötti fonon kicserélődés lényegesen gyengébb roton—roton kölcsönhatást eredményez mint ami a kísérleti eredmények értelmezéséhez szükséges. A Feynman-féle roton modell variációszámításon alapul. A variációszámítás egyik nagy hiányossága az, hogy az ilyen módon kapott gerjesztési energia a választott variációs hullámfüggvénytől csak gyengén függ. A Feynman és Cohen által javasolt 1.44-es hullámfüggvény a fononokat helyesen írja le, de kérdéses, hogy a nagyobb hullámszámú gerjesztések leírására ez a közelítés megfelelő-e. Emiatt mi a rotonok közötti kölcsönhatás leírására nem a Feynman képből indulunk ki, hanem a rotonok közötti kölcsönhatást paraméterként kezeljük és ezen kölcsönhatás következményeinek a ki-

sérleti eredményekkel való összehasonlítása útján akarunk a rotonok közötti kölcsönhatás tulajdonságaira következtetni.

Ilyen módon a szabad kvázirészecskék közötti kölcsönhatást leíró H_I Hamilton operátorról a következőket tételezzük fel. Figyelembe véve, hogy egyrészt csak a két rotonot tartalmazó állapotok, így a roton—roton kölcsönhatás, másrészt a két-rotonos állapotoknak az egy kvázirészecskét tartalmazó állapotokkal való kölcsönhatásának a vizsgálatát tűztük ki célul, ezért a kvázirészecskék közötti kölcsönhatást leíró Hamilton operátorból csak azokat a tagokat tartjuk meg, amelyek két roton egymással való ütközését, illetve a két rotonot tartalmazó állapotnak az egyrészecskés állapotba való átmenetét írják le. Ennek megfelelően a kölcsönhatási Hamilton operátort a következőnek tételezzük fel:

$$H_I = \frac{1}{2} \Sigma \Gamma_4(\vec{q}; \vec{q}'; \vec{k}) b_{\frac{k}{2}+\vec{q}}^+ b_{\frac{q}{2}-\vec{q}}^+ b_{\frac{k}{2}-\vec{q}} b_{\frac{k}{2}-\vec{q}}, \quad (2.37)$$

$$+ \Sigma \Gamma_3(\vec{q}; \vec{k}) \{ b_{\frac{k}{2}+\vec{q}}^+ b_{\frac{k}{2}-\vec{q}}^+ b_{\vec{k}} + b_{\vec{k}}^+ b_{\frac{k}{2}+\vec{q}} b_{\frac{k}{2}-\vec{q}} \},$$

ahol Γ_4 vertex a roton—roton ütközést, és Γ_3 a kétrotonos állapotnak az egyrészecskés állapotba való szóródását írja le. A kölcsönhatási Hamilton operátor egyéb tagjainak a következő hatásai vannak:

- A szabad kvázirészecske spektrum módosul, pl. a fonon—fonon kölcsönhatás módosítja a fonon energiáját. Mivel E_k^0 -at önkényesen vettük fel, ezért a hatást nem kell figyelembe vennünk.
- A szabad kvázirészecskék véges élettartamához vezet. Ezt azzal vehetjük figyelembe, hogy a szabad kvázirészecskékhez egy fenomenologikus élettartamot rendelünk, így a szabad kvázirészecske Green-függvény alakjára a következőt tesszük fel:

$$G_+^{(0)} = \frac{1}{\omega - E_k^0 + i \frac{\Gamma}{2}}, \quad (2.38)$$

ahol Γ egy fenomenologikus $\tau = \frac{1}{\Gamma}$ élettartamának felel meg.

- Renormálják a Γ_3 és Γ_4 vertexeket. Mivel ezeket is önkényes paraméterekként vettük fel, ezért ez a hatás is elhagyható.

Ahhoz, hogy konkrét számolást végezhessünk el, a Γ_3 és Γ_4 vertexeket egyszerűsíteniünk kell.

A Γ_4 vertexel a roton—roton kölcsönhatást akarjuk leírni. Feltesszük, hogy Γ_4 csak akkor különbözik zérustól, ha mind a négy részecske roton, azaz, ha a hullámszámuk a k_0 roton hullámszám körüli Δ_k tartományba esik, ahol $\Delta_k \ll k_0$. Feltételezzük, hogy a Γ_4 vertex ebben a tartományban gyengén függ a hullámszámok abszolút értékétől, így az ettől való függést elhagyjuk. Ezután a Γ_4 vertex már csak az ütköző rotonok hullámszámainak egymáshoz viszonyított szögeitől függ. A roton diszperzió sajátos alakja miatt két roton ütközés leírásánál — kivéve azt az esetet, amikor az ütköző két roton eredő hullámszáma zérus — az impulzusmomentum nem jó kvantumszám (az ütköző két roton tömegközépponti mozgása nem választ-

ható le a relatív mozgástól), a különböző impulzusmomentumú állapotok egymással keverednek. Ezért a következőképpen járunk el. Az ütközésnél a bejövő két roton hullámszáma közötti szög megegyezik a kimenő rotonok hullámszámai közötti szöggel és ezt a szöget a két roton eredő hullámszáma meghatározza. Így a $k \neq 0$ esetben az egyetlen szabad paraméter a két ütköző roton hullámszáma által kifeszített sík elfordulása az ütközés során a két roton eredő k hullámszáma mint tengely körül. Ezt a szöget φ -vel jelölve

$$\Gamma_4(\vec{q}; \vec{q}'; \vec{k}) \approx \Gamma_4(\varphi; k). \quad (2.39)$$

Ezen φ szög szerinti elfordulás szerint kifejtve a vertexet

$$\Gamma_4(\varphi; k) = \sum_m g_{4m}(k) e^{im\varphi}, \quad (2.40)$$

ahol $m=0; \pm 2; \pm 4$ (a rotonok megkülönböztethetlensége miatt m csak páros értéket vehet fel), a roton—roton kölcsönhatást a két roton eredő hullámszámától függő $g_{4m}(k)$ csatolási állandókkal írhatjuk le. A roton—roton vertex 2.40-es alakját Fomin [31] javasolta először.

Ha a két roton eredő hullámszáma zérus, akkor a rotonok ütközésénél az impulzusmomentum jó kvantumszám és így $K=0$ esetén a Γ_4 vertexet a következőképpen közelíthetjük:

$$\Gamma_4(\vec{q}; \vec{q}'; 0) = \Sigma(2l+1)P_l(\cos \theta_{qq'})g_{4l}, \quad (2.41)$$

ahol $\theta_{qq'}$, a \vec{q} és a \vec{q}' hullámszámok közötti szöget jelöli (P_l a Legendre polinom), és $l=0; \pm 2; \pm 4; \dots$, csak páros értéket vehet fel.

Meg kell jegyezni, hogy a Γ_4 vertex az ütköző rotonok hullámszámain kívül az energia változóktól is függhet, de mivel csak az energiahéj közelében levő folyamatokkal kívánunk foglalkozni, ettől a függéstől eltekinthetünk.

A Γ_3 vertexet könnyen egyszerűbb alakba írhatjuk az előbbi feltételek alapján. Mivel Γ_3 olyan folyamatot ír le, amikor a két bejövő, vagy a két kimenő részecske roton és a harmadik egy k hullámszámú egyrészecskés gerjesztés, ezért a két roton hullámszáma közötti szöget az eredő k hullámszám meghatározza, így feltehetjük, hogy

$$\Gamma_3(\vec{q}; \vec{k}) \approx g_3(k), \quad (2.42)$$

azaz a két rotonos állapotoknak az egyrészecskés állapotokkal való kölcsönhatását egy, csak k -tól függő csatolási állandóval jellemezzük [32].

Összefoglalva, a kölcsönhatási Hamilton operátort a következő alakúnak tetelezzük fel:

$$H_I = H_3 + H_4, \quad (2.43)$$

ahol

$$H_3 = \Sigma g_3(k) \{ b_{\frac{k}{2}+\vec{q}}^+ b_{\frac{k}{2}-\vec{q}}^+ b_k + b_k^+ b_{\frac{k}{2}-\vec{q}} b_{\frac{k}{2}+\vec{q}} \}, \quad (2.44)$$

$$H_4 = \frac{1}{2} \Sigma g_{4m}(k) e^{im\varphi} b_{\frac{k}{2}+\vec{p}}^+ b_{\frac{k}{2}-\vec{p}}^+ b_{\frac{k}{2}-\vec{p}'} b_{\frac{k}{2}+\vec{p}'}, \quad (2.45)$$

és a $g_3(k)$, $g_{4m}(k)$ csatolási állandókat paramétereknek tekintjük.

III. KÉTROTONOS ÁLLAPOTOK

A rotonok zérus körüli csoportsebessége következtében, ha két roton egymással ütközik, akkor azok hosszú ideig egymás közelében maradnak. Ennek következtében, ahogy azt *Ruvalds* és *Zawadowski* [15], majd *Iwamoto* [16] megmutatta, a rotonok egymáson való szóródásának leírására a Born közelítés nem alkalmazható, hanem a rotonok egymáson való többszörös szóródását is figyelembe kell venni. Ennek a végállapotkölsönhatásnak a következményeit a kétrotonos állapotsűrűségnek a kölcsönhatásmentes esethez képesti megváltozása mutatja meg a legjobban. A III.1. fejezetben *Ruvalds* és *Zawadowski* [15] nyomán ismertetjük a kétrotonos állapotoknak a II. fejezetben adott kvázirészecske modell segítségével való leírásának a módszerét. A III.2. fejezetben ismertetjük a két roton rezonanciának a létrejöttét és annak a fényszórási spektrumban való megjelenését. Ha a két roton eredő hullámszáma zérus, akkor a két roton rezonanciának lehetősége nyílik két fononra való bomlásra. A III.3. fejezetben a roton—fonon kölcsönhatás deformációs potenciál közelítésben kapott modelljét alkalmazva értelmezzük a két roton rezonancia véges élettartamát. A III.4. fejezetben az olyan kétrotonos állapotok tulajdonságait ismertetjük, amikor a két roton eredő hullámszáma nem zérus.

III.1. A kétrotonos állapotok leírása

A két rotont tartalmazó állapotokat csak a kétszeres rotonenergia környezetében kívánjuk vizsgálni és ezen állapotok leírásához a következő korrelációs függvényből indulunk ki:

$$G_2(\vec{k}; \vec{q}; \vec{q}'; t) = -i \langle T \{ b_{\frac{\vec{k}}{2} + \vec{q}}(t) b_{\frac{\vec{k}}{2} - \vec{q}}(t) b_{\frac{\vec{k}}{2} - \vec{q}'}^+(0) b_{\frac{\vec{k}}{2} + \vec{q}'}^+(0) \} \rangle. \quad (3.1)$$

Mivel egyrészt zérus hőmérsékleten a rendszerben nincs jelen termikusan gerjesztett roton; másrészt egyelőre csak a roton—roton ütközést leíró H_4 (2.45) Hamilton operátor hatását kívánjuk figyelembe venni, amely csak kétrotonos állapotok közötti átmenetet ír le, ezért $G_2(\vec{k}; \vec{q}; \vec{q}'; t)$ perturbációs számolásánál elegendő csak a két roton közbenső állapotokat tartalmazó folyamatokat figyelembe venni. Ilyen módon G_2 -re a következő Dyson egyenletet írhatjuk fel [23]:

$$\begin{aligned} G_2(\vec{k}; \vec{q}; \vec{q}'; t) = & i(2\pi)^3 G_r \left(\frac{\vec{k}}{2} + \vec{q}; t \right) G_r \left(\frac{\vec{k}}{2} - \vec{q}; t \right) \{ \delta(\vec{q} - \vec{q}') + \delta(\vec{q} + \vec{q}') \} + \\ & + i \int \frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^3} \int dt' G_r \left(\frac{\vec{k}}{2} + \vec{q}; t - t' \right) G_r \left(\frac{\vec{k}}{2} - \vec{q}; t - t' \right) \\ & \Gamma_4(\vec{q}; \vec{k}'; \vec{k}) G_2(\vec{k}; \vec{k}'; \vec{q}'; t'), \end{aligned} \quad (3.2)$$

ahol a G_r a roton Green-függvényt jelenti. Erről feltehetjük, hogy ezt az egy kvázirészecskét leíró G_+ Green-függvény pólusközelítéses alakjával közelíthetjük (2.24). A pólus erősségét meghatározó $Z_1(k)$ faktor egyrészt a Γ_4 vertexbe beolvasztható, másrészt — feltéve, hogy $Z_1(k)$ lassan változik a k_0 roton hullámszám környezeté-

ben — egy szorzófaktorot jelent $G_2(\vec{k}; \vec{q}; \vec{q}'; t)$ -ben és így szintén elhagyható. Ennek alapján a roton Green-függvényre a következő alakot tételezzük fel:

$$G_r = \frac{1}{\omega - E_k + i \frac{\Gamma}{2}}, \quad (3.3)$$

ahol E_k a kísérletileg megfigyelt roton energia [34]

$$E_k = \Delta + \frac{(k - k_0)^2}{2\mu_0}$$

$$\Delta = 0,743 \text{ meV}$$

$$k_0 = 19,26 \text{ nm}^{-1} \quad (3.4)$$

$$\mu_0 = 11,6 \text{ me}^{-1} \cdot \text{nm}^{-2}$$

a Δ_k levágási hullámszámnak megfelelő $D = \frac{\Delta_k^2}{2\mu_0}$ levágási energiát pedig 0,25 meV körüli értéknek választjuk.

Ha a két roton eredő hullámszáma zérus, akkor legyen az l impulzuszmomentumú kétrotonos Green-függvény:

$$G_{2l}(t) = \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\vec{q}'}{(2\pi)^3} (2l+1) P_l(\cos \theta_{\vec{q}\vec{q}'}) G_2(\vec{q}'; \vec{q}; t) \quad (3.5)$$

A Γ_4 vertex 2.41-es alakját a (3.2) Dyson egyenletbe helyettesítve $G_{2l}(t)$ -re a következő egyenletet kapjuk:

$$G_{2l}(t) = G_2^{(0)}(t) + \frac{1}{2} \int dt' G_2^{(0)}(t-t') g_{4l} G_{2l}(t'), \quad (3.6)$$

ahol

$$G_2^{(0)}(t) = 2i \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} [G_r(\vec{q}; t)]^2. \quad (3.7)$$

Az idő szerinti Fourier transzformáltra való áttérés után a következő egyszerű alakhoz jutunk:

$$G_{2l}(\omega) = \frac{G_2^{(0)}(\omega)}{1 - \frac{g_{4l}}{2} G_2^{(0)}(\omega)}, \quad (3.8)$$

ahol a perturbálatlan kétrotonos Green függvény:

$$G_2^{(0)}(\omega) = 2i \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega'}{2\pi} G_r(q; \omega - \omega') G_r(q; \omega'). \quad (3.9)$$

Hasonló módon, $k \neq 0$ esetén az m helicitású kétrotonos Green-függvényt a következőképpen definiáljuk:

$$G_{2m}(k; \omega) = \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\vec{q}'}{(2\pi)^3} e^{im\varphi} G_2(k; q; q'; t). \quad (3.10)$$

A Γ_4 vertex 2.40-ben adott alakját felhasználva könnyen belátható, hogy $k \gtrsim \Delta_k$ esetén:

$$G_{2m}(k; \omega) = \frac{G_2^{(0)}(k; \omega)}{1 - \frac{g_{4m}(k)}{2} G_2^{(0)}(k; \omega)}, \quad (3.11)$$

ahol

$$G_2^{(0)}(k; \omega) = 2i \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega'}{2\pi} G_r\left(\frac{\vec{k}}{2} + \vec{q}; \omega - \omega'\right) G_r\left(\frac{\vec{k}}{2} - \vec{q}; \omega'\right). \quad (3.12)$$

A kétrotonos állapotossűrűség definíciója

$$\varrho_{2i}(k; \omega) = -\frac{1}{4\pi} \operatorname{Im} G_{2i}(k; \omega); \quad i = \begin{cases} l & \text{ha } k = 0 \\ m & \text{ha } k \neq 0. \end{cases} \quad (3.13)$$

A kétrotonos Green-függvény nem más, mint $\varrho_{2i}(k; \omega)$ Hilbert transzformáltja. A perturbálatlan kétrotonos Green-függvényre az energia szerinti integrálás elvégzése után a következőt kapjuk:

$$G_2^{(0)}(k; \omega) = 4 \int \frac{\varrho(k; \omega') d\omega'}{\omega - \omega' + i\Gamma}, \quad (3.14)$$

ahol

$$\varrho_2^{(0)}(k; \omega) = \frac{1}{2} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} \delta\left(\omega - E_{\frac{\vec{k}}{2} + \vec{q}} - E_{\frac{\vec{k}}{2} - \vec{q}}\right) \quad (3.15)$$

a perturbálatlan kétrotonos állapotossűrűség. (Az $1/2$ -es faktor a rotonok megkülönböztethetetlensége miatt lép fel.)

III.2. Kétrotonos állapotossűrűség $K=0$ esetén

Halley [35] hívta fel először arra a figyelmet, hogy a szuperfolyékony hélium két gerjesztést tartalmazó állapotait fényszórással is lehet vizsgálni. Másodrendű Raman szórás esetén — amikor a fény két gerjesztést kelt, vagy nyel el, a két gerjesztés eredő hullámszáma közel zérus, mivel a fény hullámhossza sokkal hosszabb, mint a hélium atomok közötti átlagos távolság. Például két roton keltése esetén a két roton eredő hullámszáma $k \sim 2\Delta/c \sim 10^{-5} \text{ nm}^{-1}$. A szuperfolyékony hélium másodrendű Raman szórásának az elméletét Stephen [34] dolgozta ki. A fény a sűrűségfluktuációkon szóródik és a hatáskeresztmetszet a hélium atomok polarizálhatóságával arányos. A hélium atomok polarizálhatósága nagyon kicsi, ezért csak az egyszeres szórást kell figyelembe venni. A másodrendű Raman szórás a következő mechanizmusokkal mehet végbe:

— A bejövő fény egy hélium atomot polarizál. A polarizált hélium atom a környezetét polarizálva két sűrűségfluktuáció létrehozásával egy megváltozott energiájú és impulzusú fényt emittál. Ennek a folyamatnak a hatáskeresztmetszete $S^{\text{II}}(k; \omega)$ -val a dinamikus struktúra faktornak a két gerjesztést tartalmazó részével lesz arányos. Ez azonban (F9) szerint kis hullámszámoknál K^4 -el arányos, így ez a folyamat — ahogy azt Stephen [36] és Zawadowski [37] megmutatta — elhanyagolható az eggyel magasabb rendű folyamat mellett.

— Egy hélium atom abszorbeálva a bejövő fényt polarizálódik és maga körül egy dipólteret hoz létre. Ez a dipólter polarizál egy másik atomot és az emittálja a kimenő fényt. A két gerjesztést a két különböző atom emittálja. Ennek a folyamatnak a hatáskeresztmetszete a részletes számolás szerint a következő kifejezéssel arányos:

$$\int \frac{d\vec{q}d\vec{q}'}{(2\pi)} P_2(\cos \theta_{\vec{q}\vec{q}'}) S(q') S_2(\vec{q}; \vec{q}'; \omega), \quad (3.16)$$

ahol

$$S_2(q; q'; \omega) = \frac{1}{2\pi} \int dt e^{-i\omega t} \langle \varrho_q(t) \varrho_{-q}(t) \varrho_{q'}^+(0) \varrho_{-q'}^+(0) \rangle, \quad (3.17)$$

a két sűrűség korrelációs függvény, $S(k)$ a folyadék struktúra faktora. A $P_2(\cos \theta_{\vec{q}\vec{q}'})$ másodfokú Legendre polinom azért lép fel, mivel a közbenső állapotban az egyik atom a másikat egy dipólter közvetítésével polarizálja, így a létrejövő két gerjesztésnek is tükröznie kell a dipólter szimmetriáját. Ha a ϱ_q sűrűségoperátornak a b_q^2 kvázirészecske operátorokkal kifejezett alakját (2.31) 3.17-be beírjuk (csak a b_k -ban lineáris tagokat kell figyelembe venni, mert a b_k -ban másodrendű tag a két gerjesztést tartalmazó állapotot írja le), azonnal látható, hogy ez a hatáskeresztmetszet az $l=2$ -es impulzusmomentum két gerjesztés állapotok sűrűségével $\varrho_{2l}(\omega)$ -vel arányos.

Ezért vizsgáljuk meg a kétrotonos állapotok sűrűségét $k=0$ esetén. A perturbálatlan kétrotonos állapotok sűrűségére a kétszeres rotonenergia környezetében 3.15-ből a következő adódik:

$$\varrho_2^{(0)}(\omega) = \frac{k_0^2 \sqrt{\mu_0}}{4\pi^2 \sqrt{\omega - 2\Delta}} \quad \text{ha} \quad \omega > 2\Delta. \quad (3.18)$$

A kétrotonos állapotok sűrűségét (3.11 és 3.13 segítségével) könnyen kiszámolhatjuk. Az egyszerűség kedvéért vizsgáljuk a $\Gamma=0$ esetet, azaz amikor a rotonok élettartama végtelen. Ekkor az l impulzusmomentumú kétrotonos állapotok sűrűség:

$$\varrho_{2l}(\omega) = \left(\frac{k_0}{2\pi} \right)^2 \sqrt{\mu_0} \frac{\text{Im } h(\omega)}{[1 + \hat{g}_{4l} \text{Reh}(\omega)]^2 + [\hat{g}_{4l} \text{Im } h(\omega)]^2}, \quad (3.19)$$

ahol $\hat{q}_{4l} = g_{4l} \frac{k_0^2 \sqrt{\mu_0}}{2\pi}$ a dimenziótlan roton—roton csatolás és a kétszeres rotonenergia környezetében:

$$h(\omega) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\Delta - \omega}} + i\delta, & \text{ha } \omega < 2\Delta \\ -\frac{1}{\pi \sqrt{2\Delta}} + i \frac{1}{\sqrt{\omega - 2\Delta}}, & \text{ha } \omega > 2\Delta. \end{cases} \quad (3.20)$$

Egy vonzó roton—roton kölcsönhatás esetén a kétrotonos állapotok az alacsonyabb energiájú állapotok felé tolódnak el. Ahogy azt *Ruvalds és Zawadowski* [15] és tőlük függetlenül *Iwamoto* [16] megmutatta, a perturbálatlan kétrotonos állapotok sűrűségnek (3.18) 2Δ -nál levő divergenciája következtében tetszőlegesen gyenge,

vonzó roton—roton kölcsönhatás esetén a kétrotonos állapotsűrűségben a kétrotonos kontinuum alatt egy különálló csúcs jelenik meg, amelyet két roton kötött állapotaként értelmeztek.

$$\varrho_{2l}(\omega < 2\Delta) = |g_{4l}| \left(\frac{k_0 \sqrt{\mu_0}}{2\pi} \right)^2 \delta(\omega - 2\Delta + \omega_B). \quad (3.21)$$

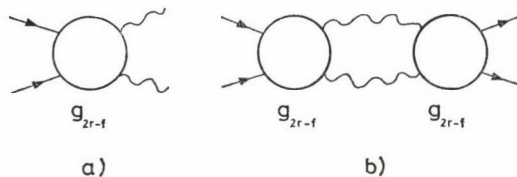
Érdemes megjegyezni, hogy mind a kötési energia $\omega_B = (\hat{g}_{4l})^2$ mind a kötött állapot súlya független a D levágási energiától.

Ha a rotonok élettartamát végesnek tételezzük fel ($\Gamma \neq 0$), akkor hasonló helyzet alakul ki, azzal a különbséggel, hogy a létrejövő kötött állapot — helyesebben szólva rezonancia — élettartama a roton élettartamának a fele lesz. Ha a kötési energia ω_B nagyobb mint Γ , akkor a két roton állapot—sűrűségben a két roton rezonancia 2Δ alatt egy 2Γ szélességű, különálló csúcsként jelenik meg.

A kísérleteket Greytak és munkatársai [14] végezték el és az eredmény nagyon szép egyezésben van a Ruvalds—Zawadowski elmélettel. A két roton rezonancia kötési energiájára kapott érték $\omega_B = 0,023$ meV, ami annak felel meg, hogy az $l=2$ impulzuszórási momentum esetén a roton—roton csatolás értéke $g_{4l=2} = -7,6 \cdot 10^{-4}$ meV nm³. Az egyetlen eltérés a két roton rezonancia élettartamában jelentkezett. A rotonok élettartamát — a két fononra való bomlás az energia és az impulzus megmaradása mellett nem lehetséges — a rotonoknak egymással való ütközése szabja meg. Így a rotonok élettartama fordítottan arányos a termikusan gerjesztett

rotonok számával $N_r \sim \sqrt{T} e^{-\frac{\Delta}{T}}$. A kísérleti eredmények azt mutatták, hogy a két roton rezonancia élettartama az $1,2 \text{ K} < T < 2 \text{ K}$ hőmérséklet tartományban a roton élettartam fele [41], alacsonyabb hőmérsékleten azonban — ahol a rotonok élettartama végtelenhez tart — a két roton rezonancia szélessége egy véges $\Gamma_0 = 9,5 \cdot 10^{-3}$ meV értékhez tart [38]. Ezt, a roton élettartamtól független szélességet a kétfononos állapotok jelenlétével lehetett értelmezni [39].

A kétrotonos állapotok a kétfononos állapotok kontinuumába esnek. A két fonont tartalmazó állapotok sűrűsége elhanyagolható a kétrotonos állapotsűrűséghez képest, ezért a másodrendű Raman szórásnál a két fonon keltést nem kell figyelembe venni. A két roton rezonanciának azonban lehetősége nyílik két — egyenként $k_c \sim \Delta/c = 4,5 \text{ nm}^{-1}$ — hullámhosszú fononra való bomlása. Ezt a folyamatot a következőképpen lehet leírni. Tegyük fel, hogy a kétrotonos állapotnak a kétfononos állapotba való bomlását egy g_{2r-f} csatolással jellemezhetjük (3.1/a ábra). Ekkor a



3.1. ábra. A kétrotonos állapotnak a kétfononos állapotba történő bomlását a 3.1/a ábrának megfelelően egy g_{2g-f} csatolással írjuk le. A kétfononos közbenső állapotok jelenléte a 3.1./b ábrának megfelelően a kétrotonos állapotok véges élettartamához vezet

kétfononos közbenső állapotok lehetősége a 3.1/b ábrának megfelelően egy $2\left(\frac{g_{2r-f}}{2}\right)^2$

$D_2(\omega)$ effektív roton—roton csatolásnak felel meg, ahol $D_2(\omega)$ a kétrotonos Green-függvény 3.1 és 3.5 definíciójával analóg módon értelmezett kétfononos Green-függvényt jelent. Mivel a kétfononos közbenső állapot szimmetriája megegyezik a kétrotonos állapotéval, ezért az l indexet az egyszerűség kedvéért elhagytuk. $h_2(\omega)$ kifejezhető a kétfononos állapot—sűrűség Hilbert transzformáltjával:

$$D_2(\omega) = 4 \int \frac{\varrho_{2f}(\omega') d\omega'}{\omega - \omega' + i\delta}, \quad (3.22)$$

ahol a fononok élettartamát végtelennek tekintettük. A fononok közötti kölcsönhatás nagyon kevésbé változtatja meg a kétfononos állapotsűrűséget, ezért azt a perturbálatlan állapotsűrűséggel közelíthetjük:

$$\varrho_{2f}^{(0)}(\omega) = \frac{1}{2} \int \frac{d\tilde{q}}{(2\pi)^3} \delta(\omega - 2cq) = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{\omega^3}{8c^3}. \quad (3.23)$$

Mivel $D_2(\omega)$ a kétszeres rotonenergia környezetében lassan változó függvény, ezért azt az $\omega = 2\Delta$ -nál levő értékével helyettesíthetjük. Így a két fonora való bomlást is figyelembe véve a rotonok közötti kölcsönhatást a következő effektív csatolással írhatjuk le:

$$g_{4\text{eff}} = g_1 - ig_2, \quad (3.24)$$

ahol

$$g_1 = g_4 - 2\left(\frac{g_{2r-f}}{2}\right)^2, \quad (3.25a)$$

$$\eta = \frac{\Delta k_D}{(2\pi c)^3} \left\{ 1 + \frac{ck_D}{4\Delta} + \frac{2\Delta}{ck_D} \ln \left(1 - \frac{ck_D}{2\Delta} \right) \right\}, \quad (3.25b)$$

$$g_2 = 2\pi(g_{2r-f})^2 \varrho_{2f}^{(0)}(\omega = 2\Delta). \quad (3.26)$$

A kétfononos Green-függvény 3.22-es előállításánál az energia szerinti integrálást egy $\omega_D = ck_D$ levágásig végeztük el. Ezzel az effektív csatolással 3.8, 3.13 és 3.20 felhasználásával a kétrotonos állapotsűrűség $\omega < 2\Delta$ esetén a következő alakba írható:

$$\varrho_2(\omega < 2\Delta) = \frac{k_0^2 \sqrt{\mu_0}}{(2\pi)^2} \frac{\hat{g}_2}{(\sqrt{2\Delta - \omega} + \hat{g}_1)^2 + (g_2)^2}, \quad (3.27)$$

ahol bevezettük a következő jelöléseket:

$$\hat{g}_1 = \frac{k_0^2 \sqrt{\mu_0}}{2\pi} g_1 \quad \text{és} \quad \hat{g}_2 = \frac{k_0^2 \sqrt{\mu_0}}{2\pi} g_2. \quad (3.28)$$

Ha $g_1 < 0$, azaz az effektív roton—roton csatolás reális része vonzó, akkor megjelenik 2Δ alatt az $\omega_B = |\hat{g}_1|^2$ kötési energiájú két roton rezonancia. Érdeemes megemlíteni, hogy a rezonancia alakja nem Lorenz görbe. Ha $|g_1| > g_2$, akkor a rezonancia a kétrotonos állapotsűrűségben egy $\Gamma_0 = 4|\hat{g}_1| \cdot \hat{g}_2$ szélességű, a két roton

kontinuumtól különálló csúcsként jelenik meg. A kísérletileg megfigyelt 0,023 meV kötési energia és a $\Gamma_0 = 9,5 \cdot 10^{-3}$ meV szélesség alapján a csatolások értékei $g_1 = -7,6 \cdot 10^{-4}$ meV \cdot nm³, $|g_2| = 7,8 \cdot 10^{-5}$ meV \cdot nm³. Meg kell említeni, hogy a kísérletek jelenlegi felbontóképesége nem teszi lehetővé annak az eldöntését, hogy a rezonancia alakja a 3.27 alakú, vagy esetleg egy Lorentz görbe.

Felhasználva g_2 értékét 3.26 alapján a két roton—két fonon csatolás értékére $|g_{2r-f}| = 2,6 \cdot 10^{-3}$ meV \cdot nm³ adódik. A csupasz roton—roton csatolást jellemző g_4 értékét 3.25-ből elég bizonytalanul megbecsülni, mivel az nagyon függ a választott k_D levágási hullámszám értékétől. Az mindenesetre látható, hogy a kétfononos köz-benső állapotok egy vonzó roton—roton kölcsönhatást jelentenek és így még g_4 gyenge tasztító értéke mellett is létre tudják hozni a két roton rezonanciát.

III.3. Roton—fonon kölcsönhatás

Mint az előzőekben láttuk, a két roton rezonancia kialakításában a kétrotonos állapotoknak a kétfononos állapotokba való bomlása lényeges szerepet játszik. Ezért érdemesnek látszik a roton—fonon kölcsönhatás részletesebb vizsgálata.

A Feynman-féle rotonkép szerint a „csupasz” rotonokat egy hosszú hullám-hosszú sűrűségfluktuációkból — fononokból — álló felhő veszi körül és ennek alapján ésszerű lenne azt feltételezni, hogy a roton—roton kölcsönhatás nem más, mint ezen felhők közötti — azaz fononok közötti — kölcsönhatás.

A rotonok és a fononok közötti kölcsönhatás fellépésének az oka a roton energiájának a sűrűségtől való függése. A folyadék sűrűségének az egyensúlyi sűrűségtől való eltérését kifejezhetjük a sűrűségfluktuációk — a fononok — szerint [3] és kis sűrűségfluktuációk esetén a lineáris tagoknál megállva:

$$\varrho(\vec{r}) - \varrho(0) = \sum_{k < k_D} \sqrt{\frac{\varrho_0 k}{2mc}} (c_k e^{i\vec{k}\vec{r}} + c_k^+ e^{-i\vec{k}\vec{r}}), \quad (3.29)$$

ahol ϱ_0 a folyadék átlagos sűrűsége, a c a hangsebesség, c_k^+ és c_k a fonon keltő és elnyelő operátorok és k_D egy levágási hullámszám. A fononok és a rotonok közötti kölcsönhatást úgy kaphatjuk meg, hogy a roton energiát a sűrűségfluktuációk szerint haladó hatványsorba fejthetjük. Egy ilyen kifejtésnek, hasonlóan 3.29-nek is csak akkor van értelme, ha csak az olyan sűrűségfluktuációkat vesszük figyelembe, amelyek hullámhossza jóval nagyobb mint az atomok közötti átlagos távolság. Ez azt jelenti, hogy $k_D \ll k_0$. Ilyen módon a roton energiának a sűrűségfluktuációk szerinti kifejtésében a lineáris tagnál megállva a

$$H_{r-f} = g_{f-r} \sum \sqrt{\frac{cq}{A}} b_{k-q}^+ (c_q^+ + c_{-q}) b_k \quad (3.30)$$

kölcsönhatási Hamilton operátor írja le az egy fonon abszorpcióját, illetve emisszióját, ahol b_k^+ a roton keltő, illetve eltüntető operátorok. A kísérleti adatok szerint [40] a roton—fonon csatolás értéke:

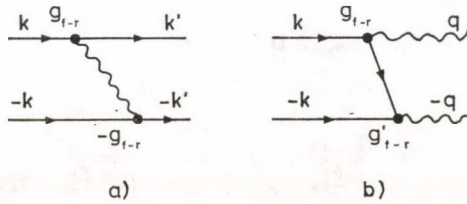
$$g_{f-r} = \frac{1}{c} \sqrt{\frac{\varrho_0 A}{2m}} \frac{\partial A}{\partial \varrho} \approx -0,06 \text{ meV} \cdot \text{nm}^{3/2}. \quad (3.31)$$

Vizsgáljuk meg, hogy ha a rotonok közötti fononkicserélődés milyen effektív roton—roton kölcsönhatásnak felel meg.

A 3.2/a ábrának megfelelő, egy fonon cseréről könnyen belátható, hogy mivel az $\omega < 2\Delta$ eset érdekel minket, így a közbenső állapotnál — amikor két roton és egy fonon van jelen — az energiahéjtól távol vagyunk, ezért a fonon propagátor — 1-el közelíthető és a fonon jelenléte a közbenső állapotban csupán egy fázistér korlátozást jelent a rotonok számára ($|\vec{k} - \vec{k}'| < k$ kell hogy teljesüljön). Így a „fononlétra” a következő roton—roton effektív csatolás fellépéséhez vezet:

$$g_{eff} = -2g_{r-f}^2 \frac{1}{\Delta} \left(\frac{k_D}{2k_0} \right)^2. \quad (3.32)$$

Ha a két roton rezonanciát ezzel a kölcsönhatással akarjuk egyedül leírni, akkor ehhez a levágási hullámszám $k_D \approx 9,5$ nm értékét kell feltételeznünk. Azonban ez a modell a deformációs potenciál közelítés jellege következtében valószínűleg nem nagyon alkalmazható ilyen nagy hullámszámok esetén.



3.2. ábra. A rotonok közötti fononkicserélődést a 3.2/a ábrán látható diagrammal írjuk le. A kétrotonos állapotnak a kétfononos állapotba történő bomlását a 3.2/b ábrának megfelelően harmadrendű vertexek segítségével írjuk le

A két roton rezonancia véges élettartamához vezető g_{2r-f} két roton—két fonon csatolást legegyszerűbb módon a 3.2/b ábrán látható folyamatból számolhatjuk. Itt két típusú roton—fonon csatolást vezetünk be. g_{r-f} az előbb tárgyalt roton—fonon csatolás, ami egy fonon emisszióját, vagy abszorpcióját írja le. A másik csatolás, g'_{r-f} két roton egy fononba való konverzióját írja le. Ez nyilvánvalóan csak virtuális folyamat lehet. Ezt a folyamatot a következő kölcsönhatási Hamilton operátorral írhatjuk le:

$$H_{2r-f} = g'_{r-f} \frac{1}{2} \sum \sqrt{\frac{cq}{\Delta}} (b_k^+ b_{-k-q}^+ + b_k b_{-k+q}) (c_q^+ + c_{-q}). \quad (3.33)$$

Gyengén kölcsönható Bose rendszer esetén — Bogoljubov közelítésben megbecsülhetjük a két típusú roton—fonon csatolás g_{r-f} és g'_{r-f} viszonyát. A Bogoljubov közelítésnél a kölcsönhatási Hamilton operátorból csak a kondenzátum betöltöttségével arányos tagokat hagyjuk meg, így a Bogoljubov közelítés Hamilton operátora:

$$H_B = H_0 + \sum \left(\varepsilon_k - \mu + \frac{N_0 V_k}{\Omega} + \frac{N_0 V_0}{\Omega} \right) a_k^+ a_k + \frac{N_0}{2\Omega} \sum V_k (a_k^+ a_{-k}^+ + a_k a_{-k}). \quad (3.34)$$

Ennek a sűrűség szerinti deriváltja — figyelembe véve, hogy ebben a közelítésben

$$\varrho = \frac{N_0}{\Omega} = n_0,$$

$$\frac{\partial H_B}{\partial \varrho} = \frac{\partial H_0}{\partial \varrho} + \Sigma \left(V_k + V_0 - \frac{\partial \mu}{\partial \varrho} \right) a_k^+ a_k + \frac{1}{2} \Sigma V_k (a_k^+ a_{-k}^+ + a_k a_{-k}). \quad (3.35)$$

Hamilton operátort a b_k^+ és b_k kvázirészecske keltő és eltüntető operátor levezetésével diagonalizálhatjuk a következő módon:

$$a_k^\alpha = u_k b_k^\alpha + v_k b_{-k}^{\alpha+}, \quad (3.36a)$$

ahol

$$u_k^2 - v_k^2 = 1 \quad \text{és}$$

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \cdot \{ \varepsilon_k + n_0 V_k + \sqrt{\varepsilon_k (\varepsilon_k + 2n_0 V_k)} \} \quad (3.36b)$$

a kémiai potenciál $\mu = n_0 V_0$. Ezzel a transzformációval

$$H^B = H_0 + \Sigma E_k^B b_k^+ b_k, \quad (3.37a)$$

és

$$\frac{\partial H_B}{\partial \varrho} = \frac{\partial H_0}{\partial \varrho} + \Sigma V_k \frac{\varepsilon_k}{E_k^B} \left\{ \alpha_k^+ \alpha_k + \frac{1}{2} (\alpha_k^+ \alpha_{-k}^+ + \alpha_k \alpha_{-k}) \right\}. \quad (3.37b)$$

Így deformációs potenciál közelítésben a kvázirészecskék és fononok közötti csatolást leíró Hamilton operátor:

$$H_I = \Sigma \frac{\varepsilon_k}{E_k^B} V_k \varrho_q \left\{ \alpha_k^+ \alpha_{k+q} + \frac{1}{2} (\alpha_k^+ \alpha_{-k-q}^+ + \alpha_k \alpha_{-k+q}) \right\}. \quad (3.38)$$

Az első tag egy fonon emisszióját, vagy abszorpcióját írja le és a második tag írja le azt a folyamatot, amikor két kvázirészecske egy fononra alakul. Látható, hogy a két folyamat csatolás megegyezik.

Természetesen ez a gyenge kölcsönhatás esetében kapott eredmény csak tájékoztató jellegű lehet a reális esetre. Azt mindenesetre biztosítja, hogy a g'_{f-f} -vel leírt kölcsönhatás létezik és remélhetjük, hogy az nem különbözik nagyságrendben a g_{f-r} csatolás értékétől.

Ilyen módon a perturbációszámítás másodrendjében a 3.3 ábrának megfelelően a két roton—két fonon csatolásra a következő kifejezést kapjuk:

$$\frac{2g_{f-r}g_{f'-r}}{\Delta} \frac{cq}{\omega - (E_k + E_{k'} + cq)}, \quad (3.39)$$

mivel az $\omega < 2\Delta$ esetre korlátozódunk, ezért a következő közelítést tehetjük:

$$\frac{cq}{\omega - (E_k + E_{k'} + cq)} \approx -1. \quad (3.40)$$

A közbenső állapotban levő roton momentumára kiátlagolva (ez egy fázisfaktort jelent, mivel $q = |k - k'| < k_D$ kell hogy teljesüljön), a két roton—két fonon csatolásra a következő kifejezést kapjuk:

$$g_{2r-r} = -2 \frac{g_{f-r} g'_{f-r}}{\Delta} \frac{\Delta_k}{k_0}. \quad (3.41)$$

Feltéve, hogy $g_{f-r} = g'_{f-r}$, ahogy azt a gyenge kölcsönhatás esetén találtuk és a g_{f-r} értékét a hosszú hullámhosszú esetben érvényes értékével (3.31) helyettesítve; ahhoz, hogy a két roton rezonancia élettartamát ezzel a folyamattal leírjuk, a levágási hullámszámnak $\Delta_k \approx 3 \text{ nm}^{-1}$ értéket kell választanunk, amely kedvező értéknek mondható.

Természetesen ezt az eredményt fenntartással kell fogadni. Egy, csak az atomok közötti távolságnál jóval nagyobb hullámhosszú sűrűségfluktuációk leírásához megfelelő deformációs potenciál közelítésből indultunk ki. Kísérletileg a csatolásnak csak a $k=0$ határesetét lehet megmérni. Ennek ellenére feltételeztünk, hogy a modell közepes hullámszámok ($k \sim 4,5 \text{ nm}^{-1}$) esetén is alkalmazható és a roton—fonon csatolás értéke változatlan, továbbá a g_{f-r} és g'_{f-r} csatolások megegyeznek, hasonlóan a gyenge kölcsönhatás esetéhez.

Ennek ellenére az látszik, hogy legalábbis $k=0$ esetén — amikor a két roton eredő hullámszáma zérus — a roton—fonon kölcsönhatás nagyon lényeges és valószínűleg egyedül le tudja írni a két roton rezonanciát. Természetesen létezik a két-roton—két fonon vertexnek olyan része is, amely nem állítható elő ilyen egyszerűen csak fonon—roton kölcsönhatást tartalmazó egyszerű folyamattal, de mivel az magasabb rendű vertex, ezért remélhető, hogy nem ad az itt tárgyalt folyamatoknál nagyobb járulékot.

III.4. Kétrotonos állapotssűrűség $K \neq 0$ esetén

A perturbálatlan kétrotonos állapotssűrűség 3.15-ből kiszámolható és $\sqrt{2} \Delta_k < k < 2k_0$ esetére a következő:

$$\varrho_2^{(0)}(k; \omega) = \frac{\mu_0 k_0^2}{4\pi k} \quad \text{ha} \quad 0 < \omega - 2\Delta < 2D, \quad (3.42)$$

azaz ellentétben a $k=0$ esettel, nem divergál a két roton kontinuum alján, hanem konstans érték. A perturbálatlan kétrotonos Green-függvényt 3.4 segítségével kapjuk (az egyszerűség kedvéért legyen $\Gamma=0$)

$$G_2^{(0)}(k; \omega) = -\frac{\mu_0 k_0^2}{2\pi k} f(\omega) - i4\pi \varrho_2^{(0)}(k; \omega), \quad (3.43a)$$

ahol

$$f(\omega) = 2 \ln \left| \frac{\omega - 2\Delta - 2D}{\omega - 2\Delta} \right|. \quad (3.43b)$$

Az m helicitású kétrotonos állapotssűrűséget 3.13 alapján a következő alakba írhatjuk:

$$g_{2m}(k; \omega) = \frac{\varrho_2^{(0)}(k; \omega)}{[1 + \hat{g}_{4m} f(\omega)]^2 + [2\pi \varrho_2^{(0)}(k; \omega) \hat{g}_{4m}]^2}, \quad (3.44)$$

ahol bevezettük a $\hat{g}_{4m} = g_{4m}(k) \frac{\mu_0 k_0^2}{4\pi k}$ dimenziómentes csatolást. Látható, hogy vonzó roton—roton kölcsönhatás esetén ebben az esetben is létrejön a két roton kötött állapota: $g_{4m} < 0$ esetén:

$$Q_{2m}(k; \omega < 2\Delta) = \frac{1}{2\pi} \frac{\omega_B}{|g_{4m}(k)|} \delta(\omega - 2\Delta + \omega_B), \quad (3.45a)$$

ahol a kötési energia:

$$\omega_B = 2De^{-\frac{1}{2|\hat{g}_{4m}|}}. \quad (3.45b)$$

Érdemes megjegyezni, hogy nagy csatolások esetén a kétrotonos állapotsűrűség a két roton kontinuumban ($\omega > 2\Delta$) a g_{4m} roton—roton csatolás négyzetével lesz fordítottan arányos (3.44). Ez nagyon világosan mutatja, hogy a vonzó roton—roton csatolás az állapotokat az alacsonyabb energiájú állapotok felé tolja el. A kétrotonos állapotsűrűség $\omega > 2\Delta$ energiáknál lecsökken és az állapotok a kötött állapotba mennek át.

A $k=0$ esettől eltérően a fononok szerepe a két roton eredő hullámszámának növekedésével erőteljesen lecsökken a rendelkezésre álló fázistér csökkenése következtében. Például a két roton kötött állapot $k > 10 \text{ nm}^{-1}$ esetén már nem tud két fononra bomlani. Hasonlóan ahhoz, ahogyan azt a $k=0$ esetben vizsgáltuk, könnyen belátható, hogy a rotonok közötti hosszú hullámhosszú fononok cseréje egy, a rotonok közötti vonzó kölcsönhatás fellépéséhez vezet a $k \neq 0$ esetben is. Ha

$$\frac{k_c}{k_0 \sqrt{1 - \left(\frac{k}{k_0}\right)^2}} \ll 1. \quad (3.46a)$$

akkor — nem túl nagy m értékek esetén — a rotonok közötti fonon kicserélődés egy

$$g_{4m}^{\text{eff}} = -\frac{g_r^2 - f}{\Delta} \frac{k_c}{\pi k_0} \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{k}{2k_0}\right)^2}} \quad (3.46b)$$

erősségű effektív roton—roton csatolás fellépéséhez vezet. Bár ez szintén vonzó jellegű, amint azt a következő fejezetben látni fogjuk, ennek erőssége messze elmarad a roton paraméterei hőmérsékletfüggésének értelmezéséhez szükséges roton—roton csatolások értékétől.

IV. A ROTONOK ÉLETTARTAMÁNAK ÉS ENERGIÁJÁNAK HŐMÉRSÉKLETFÜGGÉSE

Az előző fejezetben láttuk, hogy a rotonok közötti kölcsönhatás lényegesen megváltoztatja a kétrotonos állapotsűrűséget. Vonzó roton—roton csatolás az állapotokat az alacsonyabb energiák felé tolja el és a két rotonos kontinuum alatt a két roton rezonancia fellépéséhez vezet.

A szuperfolyékony hélium fonon—roton diszperziójának sajátos alakja következtében az energia és a hullámszám megmaradása mellett a roton nem bomolhat

el többfononos állapotba. Ilyen módon a rotonok élettartamát a rotonok egymással való ütközése határozza meg. Ha a rotonok sűrűsége nem túl nagy, akkor azt várjuk, hogy a rotonok élettartama a rotonok számával fordítottan lesz arányos. Adott T hőmérsékleten az egységnyi térfogatban levő rotonok száma:

$$N_r(T) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \frac{1}{e^{\frac{E_q}{T}} - 1}, \quad (4.1)$$

ahol a hullámszám szerinti integrálás csak a rotonok környékére vonatkozik. Ha $\Delta/T \gg 1$, akkor

$$N_r(T) = \frac{2k_0^2 \sqrt{\mu_0}}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{T} e^{-\frac{\Delta(T)}{T}} \quad (4.2)$$

(a rotonenergia $\Delta(T)$ is hőmérsékletfüggő).

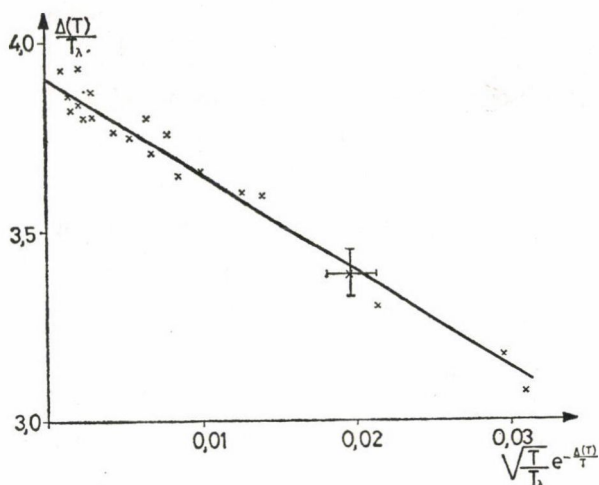
A rotonok élettartamát közvetlenül a roton gerjesztések szélességének mérésével határozhatjuk meg: $\tau_r = \frac{1}{\Gamma}$, ahol τ_r a roton élettartama, Γ a vonalszélesség. A rotonok vonalszélességét pontosabban a két roton rezonancia vonalszélességének fényszórással történő mérésével határozhatjuk meg. (A két roton rezonancia élettartama $T > 1$ K esetén az egyes rotonok élettartamának a felével egyezik meg.) Greytak és munkatársai [41] által elvégzett fényszórási kísérletek adatai szerint széles hőmérséklet tartományban $1,2 \text{ K} < T < 2 \text{ K}$, a roton vonalszélessége a rotonszámmal arányos:

$$\Gamma = (7,67 \pm 0,7) \sqrt{T} e^{-\frac{\Delta(T)}{T}} \text{ meV}. \quad (4.3)$$

Az eddig elvégzett neutronszerzési kísérletek felbontóképessége kb. $0,2\text{--}0,3 \text{ meV}$ ezért a rotonok vonalszélessége neutronszerzéssel csak nagyon pontatlanul határozható meg [13]. A jelenleg folyó nagy felbontóképességű neutronszerzési kísérletek adatai egyezéssel vannak a fényszórási kísérletekből kapott adatokkal, 4,3-al [42].

A szuperfolyékony hélium viszkozitására az elemi gerjesztések szabad úthossza, azaz az elemi gerjesztések közötti kölcsönhatás határozza meg. Alacsony hőmérsékleten ($T < 1 \text{ K}$) a viszkozitást a fonon gerjesztések és a fonon—fonon kölcsönhatás határozza meg [11]. Magasabb hőmérsékleten ($T > 1,2 \text{ K}$) a rendszerben levő — termikusan gerjesztett — rotonok számának növekedésével a folyékony viszkozitására elsősorban a roton—roton ütközések a felelősek. A viszkozitási adatokból nyert roton élettartam a kísérleti hibán belül megegyezik a fényszórásból nyert roton élettartammal [11].

A neutronszerzési mérések adatai szerint a rotonok energiája a hőmérséklet növelésével csökken. Dietrich és munkatársai [40] széles hőmérséklet ($1,2 \text{ K} < T < 2 \text{ K}$) és nyomás ($0,1 \text{ MPa} < p < 2,5 \text{ MPa}$) tartományban kimérték a rotonenergia hőmérséklet és nyomásfüggését. A szuperfolyékony hélium termodinamikai adatainak elemzése során több szerző rámutatott arra [1, 43], hogy bár a rotonenergia a hőmérséklettől és a nyomástól is függ, a redukált rotonenergia $\frac{\Delta(T, P)}{T_\lambda} = f\left(\frac{T}{T_\lambda}\right)$ csak a redukált hőmérséklet T/T_λ függvénye. (T_λ a λ átalakulás hőmérséklete.) A 4.1-es ábrán a neutronszerzési adatokból [40] nyert redukált rotonenergiát ábrázoltuk $\sqrt{\frac{T}{T_\lambda}} e^{-\frac{\Delta(T)}{T}}$ függvényében.



4.1. ábra. A redukált rotonenergia hőmérsékletfüggése Dietrich és munkatársai [40] mérései alapján. A $\Delta(T)$ mérési pontatlanságából eredő hibát egy mérési pontnál ábrázoltuk

Látható, hogy a mérési adatok a mérési hibán belül egy egyenesen helyezkednek el:

$$\frac{\Delta(T; P)}{T_\lambda} = 3,9 - 26 \sqrt{\frac{T}{T_\lambda}} e^{-\frac{\Delta(T)}{T}}. \quad (4.4)$$

A fázisátalakulási pont T_λ közelében a 4.4-es összefüggés már nem érvényes. Ennek alapján megállapíthatjuk, hogy a rotonenergia széles hőmérséklettartományban a rotonszámmal arányosan csökken. Így légköri nyomáson a rotonenergia hőmérsékletfüggése:

$$\Delta(T) \approx 0,732 - 3,36 \sqrt{T} e^{-\frac{\Delta(T)}{T}}. \quad (4.5)$$

A rotonok élettartamát először — a rotonok között egy kontakt g_4 kölcsönhatást feltételezve — Hartree—Fock közelítésben Landau és Khalatnikov [11] határozta meg. A viszkozitási adatokkal összehasonlítva a roton—roton csatolás értékére $|g_4| = 1,7 \cdot 10^{-2} \text{ meV} \cdot \text{nm}^3$ kaptak. A roton—roton ütközésnél fellépő végállapotkölcsönhatás figyelembevételével a roton élettartam konzekvens tárgyalását először Solana és munkatársaival végeztük el [23]. Megállapítottuk, hogy a roton—roton szórásnál fellépő végállapotkölcsönhatás eredményeként a kétrotonos állapot-sűrűség lényegesen megváltozik és ennek következtében a rotonok között kontakt kölcsönhatást tételezve fel a kísérletileg mért roton vonalszélességnek csupán 1/4-ed része magyarázható. Hasonló eredményre jutottak Fomin [31], Yau és Stephan [42], valamint Nagai és munkatársai [45].

A roton energiájának hőmérsékletfüggését Hartree—Fock közelítésben Ruvalds [46] számolta ki és a roton—roton csatolásra $g_4 \approx -3,5 \cdot 10^{-2} \text{ meV} \cdot \text{nm}^3$ értéket kapott. A roton—roton ütközésnél fellépő végállapotkölcsönhatás figyelembevéte-

lével először a szerző [47] határozta meg a roton energia hőmérsékletfüggését. A rotonok közötti kölcsönhatást egy kontakt kölcsönhatással helyettesítve, a kísérletileg mért rotonenergia hőmérsékletfüggésének csupán 1/6-od része értelmezhető. Hasonló eredményre jutott Nagai [48] is.

A következőkben röviden ismertetjük a roton élettartamának és energiájának hőmérsékletfüggésére elvégzett számolásainkat. Megmutatjuk, hogy a rotonok közötti kölcsönhatás nem csak a $K=0$ esetben (K a két roton eredő hullámszáma) vonzó és a kísérleti eredmények értelmezéséhez fel kell tételeznünk, hogy a rotonok közötti kölcsönhatást leíró Γ_4 vertex nagyon erősen függ az ütköző rotonok hullámszámai által kifeszített síknak az ütközés során történő elfordulása szögétől.

A kísérleti adatokból látható, hogy a roton gerjesztések élettartama az energiájukhoz viszonyítva még aránylag magas hőmérsékleten is elég hosszú. (Még $T=1, 8\text{K}$ hőmérsékleten is $\Delta\tau_r > 10$.) Ennek alapján a rotonok jól definiált egyrészesecske típusú gerjesztéseknek tekinthetők a $T \neq 0$ esetén is és ilyen módon a rotonok Green-függvénye a 3.3 kifejezés által adott pólusközelítéses alakkal helyettesíthető. A rotonok energiájának és élettartamának hőmérsékletfüggését a roton sajátenergia M határozza meg. A roton sajátenergia számolásánál a véges hőmérséklet esetére kidolgozott perturbációs számítást alkalmazzuk [20]. Ennek megfelelően a roton Green-függvényt a következő alakúnak tételezzük fel:

$$G_r(k; i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - E_k - M(k, i\omega_n)}, \quad (4.6)$$

ahol $\omega_n = 2n/T$, és n egész szám. E_k a roton diszperzió $T=0$ hőmérsékleten. Az $M(k; i\omega_n)$ sajátenergia hőmérsékletfüggetlen része csak E_k renormálását eredményezi, de mivel E_k értékét a kísérleti adatokból vesszük, ezt a renormálást elhagyjuk. Ilyen módon az M sajátenergia számolásánál csak a rotonszámmal arányos tagokat tartjuk meg. Ez azt jelenti, hogy a perturbációs számításnál csak azokat a diagrammokat vesszük figyelembe, amelyek egy visszafutó — termikusan gerjesztett rotonnak megfelelő — roton vonalat tartalmaznak.

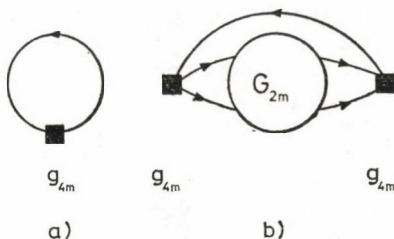
Ha a rotonok közötti kölcsönhatást a 2.45-ös Hamilton operátorral írjuk le, akkor a roton sajátenergia az egyes m helicitás kvantumszámmal jellemzett sajátenergiák összegeként állítható elő:

$$M(k; i\omega_n) = \sum_m M_m(k; i\omega_n). \quad (4.7)$$

Vizsgáljuk meg egy adott m értékhez tartozó sajátenergiát. Ehhez a 4.2 ábrán látható diagrammok adnak a rotonszámmal arányos járulékokat. A 4.2a diagram a Hartree—Fock közelítésnek felel meg, míg a 4.2b diagram által leírt folyamatnál a közbenső állapotban a két roton egymáson való többszörös szóródását is figyelembe vesszük. A 4.2. ábrának megfelelő sajátenergia:

$$M_m(k; i\omega_n) = T \sum_{n'} \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} G_r(q; i\omega_{n'}) (2g_{4m} + g_{4m}^2 G_{2m})_{\vec{k} + \vec{p}i\omega_n + i\omega_{n'}}. \quad (4.8)$$

A rotonok egymáson való tetszőleges számú szóródását leíró G_{2m} kétrotonos Green-függvényt a 3.11 és 3.43 kifejezések adják meg.



4.2. ábra. A roton sajátenergiához a rotonszámmal arányos két járulék. A 4.2/a diagram a Hartree—Fock közelítésnek felel meg, a 4.2/b diagram által leírt folyamatnál a rotonok egymáson való többszörös szóródását is figyelembe vesszük

A sajátenergia 4.8-as kifejezésében az n szerinti összegezés az összegzésnek kontur integrállá való átalakításával végezhető el. Meg kell jegyezni, hogy a roton Green-függvény pólusából adódó járulékot kell figyelembe venni. A kétrotonos Green-függvény pólusa a kétszeres rotonenergia környékére esik. Alacsony hőmérsékleten a kétszeres rotonenergiájú állapotok betöltöttsége elhanyagolható a visszafutó rotonvonalnak megfelelő termikusan gerjesztett roton betöltöttsége mellett. Ezzel a közelítéssel:

$$M_m(k; \omega) = \int d\omega' \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{\varrho_1(q; \omega')}{(e^{\frac{\omega'}{T}} - 1)} \frac{2g_{4m}(\vec{k} + \vec{q})}{1 - \frac{g_{4m}(\vec{k} + \vec{q})}{2} G_2^{(0)}(\vec{k} + \vec{q}; \omega + \omega')}, \quad (4.9)$$

ahol bevezettük az egyrotonos spektrálfüggvényt a következő módon:

$$\varrho_1(k; \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im } G_r(k; \omega) \quad (4.10)$$

és valós energia változóra térünk át. A sajátenergia 4.9-es kifejezésében a hullámszám szerinti integrálás a termikusan gerjesztett roton energiája szerinti összegezést jelent, az ω' szerinti integrálás pedig a termikusan gerjesztett roton energiájának a véges roton élettartam következtében szükséges átlagolást jelent. Alacsony hőmérsékleten, amikor a roton véges élettartamából eredő energia bizonytalanság kisebb mint a hőmérséklet — a kísérleti adatok szerint $T \gg \Gamma$, ha $T \gg 1,8 \text{ K}$ — az egyrotonos spektrálfüggvényt a következőképpen közelíthetjük: $\varrho_1(k; \omega) = \delta(\omega - E_k)$. Ezzel a közelítéssel a sajátenergiára a következő kifejezést kapjuk:

$$M_m(k; \omega) = \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} e^{-\frac{E_q}{T}} \frac{2g_{4m}(\vec{k} + \vec{q})}{1 - \frac{g_{4m}(\vec{k} + \vec{q})}{2} G_2^{(0)}(\vec{k} + \vec{q}; \omega + E_q)}. \quad (4.11)$$

A roton sajátenergia Hartree—Fock közelítését akkor kapjuk vissza, ha 4.11-ben az integrál alatti kifejezés nevezőjét 1 körül sorbafejtjük:

$$M_m^{H-F}(k; \omega) = \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} e^{-\frac{E_q}{T}} \{2g_{4m} - i4\pi g_{4m}^2 \varrho_2^{(0)}\}_{\vec{k}+\vec{q}}^{\omega+E_q}. \quad (4.21)$$

Az első tag a rotonenergia hőmérsékletfüggéséhez ad a rotonszámmal arányos járulékot, míg a második tag — ahol csak a képzetes részt vettük figyelembe — a roton élettartamhoz ad egy, a roton—roton csatolás négyzetével arányos járulékot. Nyilvánvaló, hogy ezen közelítés érvényessége még a gyenge csatolások határesetében is erősen vitatható, hiszen ahogy azt az előző fejezetben láttuk, tetszőlegesen gyenge vonzó roton—roton csatolás esetén is létrejön a két roton kötött állapota és a kötési energiának megfelelő helyen a 4.11 nevezőjének reális része zérussá válik.

A roton—roton szórásnál fellépő végállapotkölcsonhatás egyik fontos következménye, hogy a roton sajátenergia a nagy csatolás határesetében — ellentétben a 4.12-vel adott Hartree—Fock közelítéssel — egy, a roton—roton csatolás értékétől független konstans értéket tart.

$$\lim_{|\theta_{m1}| \rightarrow \infty} M_m(k; \omega) = - \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} e^{-\frac{E_q}{T}} \frac{4}{G_2^{(0)}(k+q; \omega+E_q)}. \quad (4.13)$$

Ennek értelmezésére később térünk rá.

A roton vonalszélességet — az élettartam reciprokát — a roton sajátenergia imaginárius részének a roton hullámszámnál és a roton energiánál levő értéke adja.

$$\Gamma = -2 \operatorname{Im} M(k_0; \Delta(T)). \quad (4.14)$$

Az egyes m helicitású csatornák járulékat a kétrotonos állapotsűrűség 3.13-as definíciójának felhasználásával 4.12-ből kapjuk meg:

$$\operatorname{Im} M_m(k; \omega) = -4\pi \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} e^{-\frac{E_q}{T}} |g_{4m}(\vec{k}+\vec{q})|^2 \varrho_{2m}(\vec{k}+\vec{q}; \omega+E_q). \quad (4.15)$$

A 4.15-ös kifejezésre egy felső korlát adható a következő módon. Felhasználva a kétrotonos állapotsűrűség 3.11 és 3.13-as definícióját.

$$\operatorname{Im} M_m(k; \omega) = -4\pi \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} e^{-\frac{E_q}{T}} \frac{g_{4m}^2 \varrho_2^{(0)}}{\left[1 - \frac{g_{4m}}{2} \operatorname{Re} G_2^{(0)}\right]^2 + [2\pi g_{4m} \varrho_2^{(0)}]^2} \Bigg|_{\substack{\vec{k}+\vec{q} \\ \omega+E_q}}. \quad (4.16)$$

A nevező első tagjának elhagyásával:

$$\operatorname{Im} M_m(k; \omega) \cong \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} e^{-\frac{E_q}{T}} \frac{1}{\pi \varrho_2^{(0)}(\vec{k}+\vec{q}; \omega+E_q)}. \quad (4.17)$$

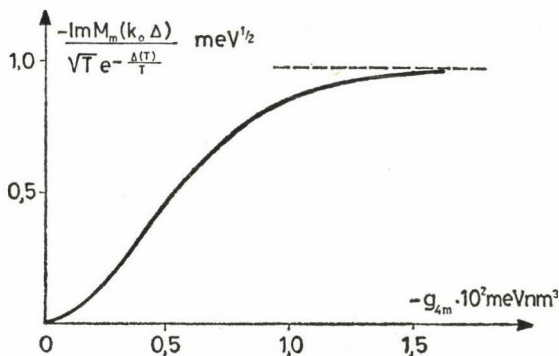
A roton élettartamot a sajátenergiának a k_0 hullámszámnál és $\omega = \Delta(T)$ energiánál levő értéke adja, ezért a perturbálatlan kétrotonos állapotsűrűség 3.42-es alakját felhasználva a hullámszám szerinti integrálás elvégzése után a következő felső becslést kapjuk:

$$\operatorname{Im} M_m(k_0; \Delta(T)) \cong \frac{16}{3\mu_0 k_0} N_r(T). \quad (4.18)$$

Erre a felső korlátra — amelyet Yau—Stephen korlátnak neveznek — Fomin [31] és Yau és Stephen [42] mutatott rá először. A kísérletileg mért roton paramétereket 4.18-ba helyettesítve azt kapjuk, hogy egy adott m helicitású csatornából származó sajátenergiával a kísérletileg megfigyelt roton szélességnek csak kb. 1/4-ed részét lehet megmagyarázni.

A sajátenergia képzetes részének 4.16-os kifejezésében a hullámszám szerinti integrálás — feltételezve, hogy a g_{4m} csatolás hullámszámtól független — numerikusan elvégezhető. A 4.3 ábrán a sajátenergia képzetes részét ábrázoltuk a g_{4m} roton—roton csatolás függvényében, negatív g_{4m} értékek esetén. Az ábráról látható, hogy a roton—roton csatolás kis értékei esetén $\text{Im } M_m(k_0; \Delta(T))$ — a Hartree—Fock közelítésnek megfelelően — a csatolási állandó négyzetével arányosan növekszik és nagyobb csatolások esetén a Hartree—Fock közelítéstől eltérve a 4.18-al adott korláthoz tart.

A roton sajátenergia képzetes részének a csatolási állandótól a 4.3 ábrán látható függése a következőképpen értelmezhető.

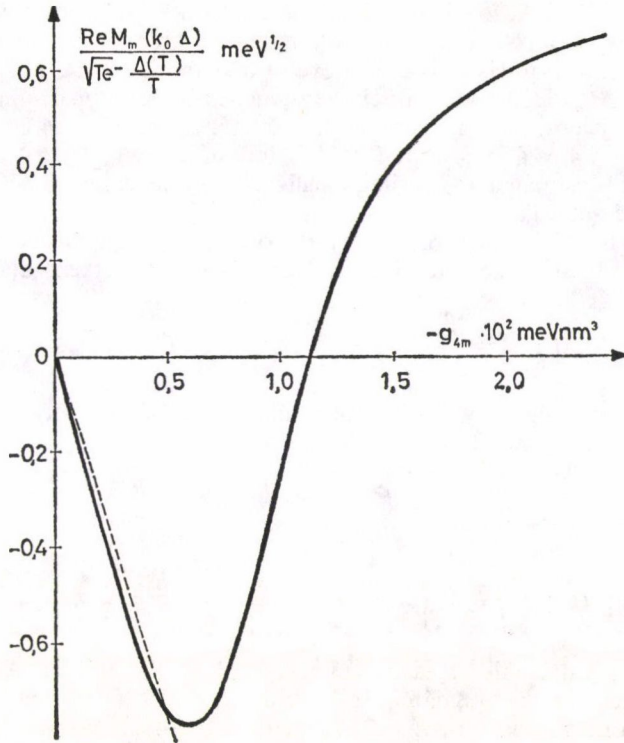


4.3. ábra. Az egyes m helicitású csatornákból M_m sajátenergia képzetes része a g_{4m} csatolási állandó függvényében. A szaggatott vonal a 4.18-as kifejezés által megadott korlátnak felel meg

A 4.15-ös kifejezésből látható, hogy $\text{Im } M_m$ az adott m helicitású kétrotonos állapotsűrűségnek a két roton kontinuumban $(\Delta + E_q \cong 2\Delta)$ felvett értékével arányos. Ahogy azt az előző fejezetben láttuk, a rotonok között vonzó jellegű roton—roton kölcsönhatás a kétrotonos állapotokat az alacsonyabb energiájú állapotok felé tolja el. Tetszőlegesen gyenge vonzó roton—roton csatolás mellett egyrészt létrejön a két roton kontinuum alatt a két roton kötött állapota és egyúttal a két roton kontinuumban $\omega > 2\Delta$ a kétrotonos állapotsűrűség lecsökken. A roton—roton csatolás nagy értékei esetén az állapotsűrűség esetén a csatolás négyzetével lesz fordítottan arányos és így a sajátenergia képzetes része egy véges, a 4.18-al adott értékhez tart. Ugyanez a helyzet áll elő akkor is, ha a roton—roton csatolás $g_{4m} > 0$. Ekkor az állapotok a magasabb energiák felé tolódnak el és a kétszeres rotonenergia környékén az állapotsűrűség lecsökken.

A roton sajátenergia reális része a roton energiájának hőmérsékletfüggését határozza meg a következő egyenlettel:

$$\Delta(T) - \Delta(0) = \sum_m \text{Re } M_m(k_0; \Delta(T)). \quad (4.19)$$



4.4. ábra. A roton sajátenergia reális részének egy adott m helicitású csatornából eredő járuléka a g_{4m} csatolás függvényében. A szaggatott vonal a Hartree—Fock közelítés

A sajátenergia képzetes részéhez hasonlóan az egyes m csatornához tartozó sajátenergia reális részére is megadható egy felső korlát [47]:

$$|\operatorname{Re} M_m(k_0; \omega \sim \Delta)| < \frac{8}{3\mu_0 k_0} N_r(T). \quad (4.20)$$

A roton paramétereit felhasználva azt kapjuk, hogy egy adott m csatornához tartozó sajátenergia a rotonenergia hőmérsékletfüggésének mindössze kb. 1/6-od részét képes megmagyarázni.

Az egyes m csatornához tartozó M_m sajátenergia 4.11-es kifejezésében levő hullámszám szerinti integrálást — ismét feltéve, hogy a g_{4m} roton—roton csatolás értéke hullámszámtól független — numerikusan el lehet végezni. A sajátenergia reális része energiatfüggése ismeretében a 4.19-es egyenlet megoldásával a rotonenergia hőmérsékletfüggése meghatározható. $\operatorname{Re} M_m$ a rotonenergia környékén lassan változó függvény [47] és így azt a $\Delta(T=0)$ -nál felvett értékével helyettesíthetjük. A rotonenergia hőmérsékletfüggéséhez egy adott m helicitású csatornából adódó járulékot $\operatorname{Re} M_m(k_0; \Delta)$ -t ábráztunk a 4.4-es ábrán a g_{4m} roton—roton csatolás függvényében (imét csak a $g_{4m} < 0$ esetet tárgyaljuk). A g_{4m} csatolás kis értékei

esetén a Hartree—Fock közelítésnek (4.12) megfelelően $\text{Re } M_m$ a csatolási állandóval arányosan változik és a rotonenergiát a rotonszámmal arányosan csökkenő járulékot ad. A roton—roton csatolás erősségét növelve a Hartree—Fock közelítéstől jelentősen eltérve $\text{Re } M_m$ előjelet vált, amely a rotonenergiát a rotonszámmal arányosan növelő járulékot jelent. A nagy csatolás határesetében $\text{Re } M_m$ a 4.20-al adott felső korláthoz tart. A 4.4-es ábra szerint $\text{Re } M_m$ minimuma a $g_{4m} \approx -6 \cdot 10^{-3} \text{ meV} \cdot \text{nm}^3$ körül van, de itt is csupán a kísérletileg megfigyelt rotonenergia hőmérsékletfüggésének kb. 1/7-ed részét adja.

Az egyes m helicitású csatornához tartozó sajátenergia reális részének a 4.4-es ábrán látható viselkedése megértéséhez írjuk át 4.11-et a következő alakba:

$$M_m(k; \omega) = \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} e^{-\frac{E_q}{T}} \{2g_{4m} + g_{4m}^2 G_{2m}\}_{\vec{k}+\vec{q}; \omega+E_q}. \quad (4.21)$$

A kétrotonos Green-függvény a kétrotonos állapotsűrűség Hilbert transzformációjaként állítható elő. Így M_m a következő alakba írható:

$$M_m(k; \omega) = 2 \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} e^{-\frac{E_q}{T}} \left(\{g_{4m}(\vec{k}+\vec{q}) + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} g_{4m}^2(\vec{k}+\vec{q}) \int \frac{d\omega'}{2\pi} \left\{ \frac{\varrho_2(\vec{k}+\vec{q}; 2\Delta - \omega')}{\omega' + (\omega + E_q - 2\Delta)} - \frac{\varrho_2(\vec{k}+\vec{q}; 2\Delta + \omega')}{\omega' - (\omega + E_q - 2\Delta)} \right\} \right) \right). \quad (4.22)$$

A 4.22-es kifejezés második tagjáról a következőket lehet látni: A rotonenergia hőmérsékletfüggését a roton sajátenergiának az $\omega = \Delta(T)$ rotonenergiánál felvett értéke határozza meg, tehát $\omega + E_q \approx 2\Delta$. Ilyen módon 4.22 második tagja közelítőleg a kétrotonos állapotsűrűségnek a kétszeres rotonenergia alatti és feletti értékének különbségével arányos. Perturbálatlan esetben ($g_{4m}=0$) csak az $\omega > 2\Delta$ energiájú kétrotonos állapotok léteznek. A g_{4m} csatolás negatív értékei esetén létrejön 2Δ alatt a két roton kötött állapot. Így, bár a 4.22 második tagja a g_{4m} csatolás kis értékei esetén negatív — azaz a rotonenergiát csökkenti —, de a csatolás erősségének növelésével a kétrotonos állapotoknak egyre nagyobb része megy át a két roton kontinumból a két roton kötött állapotba. Ilyen módon a csatolás erősségének növelésével — durva közelítéssel, amikor a 2Δ feletti állapotok száma megegyezik a 2Δ alatti állapotok számával — 4.22 második tagja előjelet vált és így a rotonenergiát növelő járulékot ad.

Ha a $g_{4m} > 0$, akkor tetszőleges csatolási érték esetén $\text{Re } M_m > 0$ lesz, így ez az eset számunkra érdektelen.

Meg kell jegyeznünk, hogy ha a g_{4m} roton—roton csatolás a hullámszámtól is függ, akkor csupán a 4.3 és a 4.4-es ábrán látható görbék alakja változik, de a sajátenergia képzetes részére adott 4.18-as és a reális részére adott 4.20-as felső korlát továbbra is érvényes marad.

Megállapíthatjuk, hogy egy adott m csatornához tartozó sajátenergia a roton élettartamának csak 1/4-ed, a rotonenergia hőmérsékletfüggésének csupán 1/7-ed részét képes leírni. Ennek alapján a kísérleti eredmények értelmezésére fel kell tételni, hogy legalább hat-hét különböző m csatornához tartozó g_{4m} roton—roton csatolás negatív és elég erős. A 4.3 és 4.4. ábra alapján például feltételezhető az, hogy hét különböző m csatornához tartozó $g_{4m} \approx -6 \cdot 10^{-3} \text{ meV} \cdot \text{nm}^3$. Ekkor, ha a többi

csatornához tartozó csatolások elhanyagolhatóan kicsinyek, akkor a kísérleti eredményeket hét csatorna feltételezésével leírhatjuk. Természetesen egyrészt nem tudhatjuk azt, hogy melyik m helicitás kvantumszámokhoz tartozó g_{4m} csatolásokat kell erősnek választanunk, másrészt számtalan egyéb lehetőség is elképzelhető, például lehet az is, hogy hétnél jóval több csatorna jelentős, de ezek közül néhány g_{4m} csatolás pozitív. Ennek ellenére ésszerűnek látszik azt feltételezni, hogy csak a minimális számú, tehát hat-hét csatornához tartozó g_{4m} csatolás játszik jelentős szerepet és a többi csatorna járuléka elhanyagolható.

Az a tény, hogy a roton paraméterei hőmérsékletfüggésének értelmezéséhez ilyen nagy számú m csatornához tartozó csatolásról fel kell tételeznünk, hogy jelentős szerepet játszik ez a Γ_4 roton—roton ütközést leíró vertexre (2.39) nézve azt jelenti, hogy

$$\Gamma_4(k; q) = \sum_m g_{4m}(k) e^{im\varphi}$$

nagyon erősen függ a bejövő, illetve a kimenő rotonok hullámszámai által meghatározott síknak az ütközés során történő elfordulásától.

V. A KÉTROTONOS ÁLLAPOTOK ÉS AZ EGY GERJESZTÉST TARTALMAZÓ ÁLLAPOTOK KÖZÖTTI KÖLCSÖNHATÁS KÖVETKEZMÉNYEI

A szuperfolyékony héliumon végzett neutronszerési kísérletek a rendszer sűrűségfluktuációs gerjesztéseinek energiájára adnak felvilágosítást. A kísérleti eredmények szerint a neutronszerési spektrumban a fonon—roton gerjesztések mellett a több gerjesztést tartalmazó állapotok is megjelennek, amelyek közül a két roton gerjesztést tartalmazó állapotok adják a legjelentősebb járulékot. A következőkben azt vizsgáljuk meg, hogy a neutronszerési adatokból milyen következtetéseket vonhatunk le a rotonok közötti kölcsönhatás természetéről.

Már Feynman [3] felhívta a figyelmet arra, hogy az általa javasolt gerjesztési spektrum elveszti az értelmét, amint az egy gerjesztést tartalmazó állapot energiája eléri a két gerjesztést tartalmazó állapotok (elsősorban a kétrotonos állapotok) energiáját. Pitaevskij [12] megmutatta, hogy ha az egy gerjesztést tartalmazó állapotnak lehetősége nyílik a két roton gerjesztést tartalmazó állapotba való bomlásra, akkor a gerjesztési spektrum két ágra bomlik fel. Az alsó ág — amely a rendszer elemi gerjesztéseit adja — a kétszeres rotonenergia felé közeledve elhajlik a Landau—Feynman-féle spektrumtól és egy kritikus hullámszámnál vízszintes érintővel 2 Δ -t elérve véget ér. A neutronszerési kísérletek igazolták a rendszer gerjesztési spektrumának Pitaevskij által javasolt viselkedését [13]. A rotonok közötti kölcsönhatás figyelembevételével az egy gerjesztéses és a kétrotonos állapotok közötti hibridizációt először Iwamoto [49], majd részletesen Zawadowski és munkatársai tárgyalták [32]

Egy erősen kölcsönható Bose rendszer dinamikus struktúra faktorának $S(k; \omega)$ -nak a mikroszkopikus elméleten alapuló számolására nem áll rendelkezésre megfelelő módszer. A korrelált bázis függvények módszerével (I. fejezet) számos próbálkozás történt $S(k; \omega)$ számolására [23, 25], azonban az alkalmazott közelítések jogossága erősen kétséges. A következőkben nem utolsósorban az egyszerűség kedvéért a II. fejezetben ismertetett modell alapján próbálunk a dinamikus struktúra

neutronszerzési kísérletekből kapott adatai alapján a rotonok közötti kölcsönhatás tulajdonságaira következtetni [50].

A dinamikus struktúra faktor számolásához szükségünk van az egy sűrűség-fluktuációt tartalmazó állapotra $\varrho_k^+|\Phi\rangle$ -ra, ahol $|\Phi\rangle$ a rendszer alapállapotát jelöli. Az I. fejezet eredményei alapján tudjuk, hogy a kondenzátum jelenléte következtében a rendszer részecskés korrelációs függvényének pólusai a sűrűség—sűrűség korrelációs függvényben is megjelennek és legalábbis kis hullámszámok esetén ezek az egy kvázirészecske gerjesztést tartalmazó állapotok adják a leglényegesebb járulékot $\varrho_k^+|\Phi\rangle$ -hoz. Ennek alapján feltételezzük, hogy az egy sűrűségfluktuációt tartalmazó állapot előállítható az egy, két stb. kvázirészecske gerjesztést tartalmazó állapotok lineáris kombinációjaként:

$$\varrho_k^+|\Phi\rangle = A_1(k)b_k^+|\Phi\rangle = \sum_{\vec{k}'} A_2(\vec{k}'; \vec{k}-\vec{k}')b_{\vec{k}'}^+b_{\vec{k}-\vec{k}'}^+|\Phi\rangle + \dots, \quad (5.1)$$

ahol b_k^+ kvázirészecske keltő operátorok jól definiált — energiájukhoz képest hosszú élettartamú — fonon—roton gerjesztéseket írnak le. Az A_1, A_2, \dots , együtthatókkal az egy, két stb. kvázirészecskés állapotok súlyát írjuk le. (Kis hullámszámok esetén a több gerjesztést tartalmazó állapotok súlya elhanyagolható A_1 -hez képest.) Mivel minket a több gerjesztést tartalmazó állapotok közül egyedül a kétrotonos állapotok érdekelnek, ezért 5.1-ben egyrészt elhagyjuk a kettőnél több gerjesztést tartalmazó állapotokat, másrészt a két gerjesztést tartalmazó állapotok közül is csak a két-rotonos állapotokat tartjuk meg. Ennek alapján feltételezve, hogy $A_2(\vec{k}, \vec{k}-\vec{k}')$ a roton hullámszáma k_0 környékén lassan változó függvény, azaz csak a két roton eredő hullámszámtól, k -tól függ, a következő közelítést alkalmazzuk:

$$\varrho_k^+|\Phi\rangle = A_1(k)b_k^+|\Phi\rangle + A_2(k) \sum_r b_k^+b_{\vec{k}-\vec{k}'}^+|\Phi\rangle, \quad (5.2)$$

ahol az r index azt jelenti, hogy az összegezés csak a roton állapotokra vonatkozik. Látható, hogy 5.2-ben csak az $m=0$ helicitású kétrotonos állapotok lépnek fel.

Számítástechnikai okokból a $S(k; \omega)$ -t a sűrűség—sűrűség korrelációs függvényből számoljuk. Az egy sűrűségfluktuációt leíró állapot 5.2-vel adott közelítését F2-be helyettesítve:

$$S(k; \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \{ A_1^2(k)G_1(k; \omega) + A_2^2(k)G_{2,m=0}(k; \omega) + 2A_1(k)A_2(k)G_{12}(k; \omega) \}, \quad (5.3)$$

ahol a következő korrelációs függvényeket vezettük be:

$$G_1(k; \omega) = -i \int dt e^{i\omega t} \langle \Phi | T \{ b_k(t)b_k^+(0) \} | \Phi \rangle \quad (5.4)$$

az egyrészecskés Green-függvény, amely definíció szerint megegyezik a 2.1-ben definiált G_+ Green-függvénnyel. Ha az egy gerjesztést tartalmazó állapotok és a kétrotonos állapotok között nincs kölcsönhatás, akkor a szabad egyrészecskés Green-függvényt a II. fejezet alapján a következőképpen közelítjük:

$$G_r^{(0)}(k; \omega) = \frac{1}{\omega - E_k^0 + i\frac{\Gamma}{2}} \quad (5.5)$$

$G_{2m=0}$ a 3.10-el definiált $m=0$ helicitású kétrotonos Green-függvény. Az egy gerjesztést tartalmazó állapotoknak a kétrotonos állapotokkal való keveredését a G_{12} jesztést tartalmazó állapotoknak a kétrotonos állapotokkal való keveredését a $G_{12}(k; \omega)$ Green-függvénnyel írjuk le, melynek definíciója:

$$G_{12}(k; \omega) = -i \int dt e^{-i\omega t} \langle \Phi | T \{ b_k(t) \sum_{k'} b_{k'}^+(0) b_{k-k'}^+(0) \} | \Phi \rangle. \quad (5.6)$$

Az egy gerjesztést tartalmazó állapotok és a kétrotonos állapotok közötti kölcsönhatást a 2.43 és 2.44-ben adott Hamilton operátorral írjuk le. Mivel $S(k; \omega)$ -ban 5.3 szerint csak az $m=0$ helicitású kétrotonos Green-függvény szerepel és szimmetria okokból nyilvánvaló, hogy az egyrészcscs állapott csak az $m=0$ helicitású kétrotonos állapothoz csatolódhat, ezért a rotonok közötti kölcsönhatást leíró H_4 Hamilton operátorban csak az $m=0$ helicitású kétrotonos állapotok közötti átmenethez tartozó $g_{4m=0}$ csatolást tartjuk meg. Az egyszerűség kedvéért a továbbiakban az m indexet elhagyjuk. Így a 2.44 és 2.45 kölcsönhatási Hamilton operátor hatását a következő Dyson egyenlettel írhatjuk le:

$$\begin{vmatrix} G_1 & G_{12} \\ G_{12} & G_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} G_1^{(0)} & 0 \\ 0 & G_2^{(0)} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} G_1^{(0)} & 0 \\ 0 & G_2^{(0)} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 0 & g_3 \\ g_3 & \frac{g_4}{2} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} G_1 & G_{12} \\ G_{12} & G_2 \end{vmatrix}, \quad (5.7)$$

ahol az egyszerűség kedvéért nem írtuk ki az energia és a hullámszám változókat. $G_2^{(0)}$ a 3.43-as kifejezéssel adott, az $m=0$ helicitású szabad kétrotonos Green-függvény.

Az 5.7-es Dyson egyenletet megoldva a kétrotonos Green-függvényre a következő kifejezést kapjuk:

$$G_2(k; \omega) = \frac{G_2^{(0)}(k; \omega)}{1 - \frac{1}{2} [g_4(k) + 2g_3^2(k)G_1^{(0)}(k; \omega)]G_2^{(0)}(k; \omega)}. \quad (5.8)$$

A szabad egyrészcscs Green-függvény 5.5-ben adott kifejezését felhasználva (az egyszerűség kedvéért a szabad gerjesztések élettartamát végtelennek véve, azaz $\Gamma=0$), vezessük be a

$$g_{4\text{eff}} = g_4(k) + \frac{2g_3^2(k)}{\omega - E_k^0} \quad (5.9)$$

effektív csatolást. A kétrotonos Green-függvény 5.8-as és 3.8-as kifejezést összehasonlítva látható, hogy a kétrotonos állapotok és az egy gerjesztést tartalmazó állapotok közötti kölcsönhatás következményeként az $m=0$ helicitású kétrotonos állapotban a rotonok közötti kölcsönhatást már nem a „csupasz” g_4 csatolás, hanem 5.9-ben definiált energiától is függő, $g_{4\text{eff}}(k; \omega)$ effektív csatolás írja le [47].

Az 5.7-es Dyson egyenlet megoldását $S(k; \omega)$ 5.3-as kifejezésébe helyettesítve, felhasználva a szabad kétrotonos Green-függvény 3.24 és 3.43 által adott alakját, $S(k; \omega)$ a következő alakba írható:

$$S(k; \omega) = \frac{[A_1 \cdot g_3 + A_2(\omega - E_k^0)]^2 \cdot 4\varrho_2^{(0)}(k; \omega)}{(\omega - E_k^0)^2 \{ [1 - \eta g_{4\text{eff}} \cdot f(\omega)]^2 + [2\pi\varrho(k; \omega)g_{4\text{eff}}]^2 \}}, \quad (5.10)$$

ahol

$$\eta = \frac{\mu_0 k_0^2}{4\pi k}.$$

Vizsgáljuk először az $\omega > 2\Delta$ energiatartományt. Ekkor $\varrho_2^{(0)}(k; \omega < 2\Delta) = 0$, tehát $S(k; \omega)$ a következő alakba írható:

$$S(k; \omega) = \frac{[A_1 g_3 + A_2(\omega - E_k^0)]^2}{|g_{4\text{eff}}|(\omega - E_k^0)^2} 2\delta(\omega - \eta g_{4\text{eff}} f(\omega)). \quad (5.11)$$

Vezessük be a következő dimenziómentes csatolásokat

$$\hat{g}_4 = \eta g_4(k) \quad (5.12a)$$

$$\hat{q}_3^2 = \frac{\eta}{D} g_3^2(k). \quad (5.12a)$$

Az 5.11 és az 5.12-es kifejezésekből látható, hogy $S(k; \omega)$ -ban 2Δ alatt akkor jelenik meg különálló csúcs, ha az effektív roton—roton csatolás vonzó, $g_{4\text{eff}}(k; \omega) < 0$. Ekkor a gerjesztési spektrumot az

$$\omega - E_k^0 = -2D \frac{\hat{q}_3^2 f(\omega)}{1 + \hat{q}_4 f(\omega)} \quad (5.13)$$

egyenlet megoldása (esetleg megoldásai) adják. Vizsgáljuk először azt az esetet, amikor a perturbálatlan gerjesztési energia $E_k^0 \ll 2\Delta$. Ekkor, mivel az 5.13-as egyenlet jobb oldala a két roton kontinuumtól távol lassan változó függvény, az 5.13-as egyenletnek lesz egy megoldása a perturbálatlan gerjesztési energia közelében. Ezt a megoldását E_k -val jelölve,

$$E_k = E_k^0 - 2D \frac{\hat{q}_3^2 f(E_k)}{1 + \hat{q}_4 f(E_k)}. \quad (5.14)$$

Ezt az E_k gerjesztési energiát feleltethetjük meg a szuperfolyékony hélium fonon—roton spektrumának és ez a következő járulékot adja $S(k; \omega)$ -hoz:

$$\frac{A_2^2(k) \left[1 + \frac{A_2(k)}{A_1(k)} \frac{E_k - E_k^0}{g_3(k)} \right]^2 \delta(\omega - E_k)}{1 + \hat{q}_3^2 \frac{4D}{[1 + \hat{q}_4 f(E_k)]^2 (2\Delta - E_k)(2\Delta + 2D - E_k)}}. \quad (5.15)$$

$S(k; \omega)$ -ban a fonon—roton gerjesztéseknek megfelelő csúcs mellett megjelennek a kétrotonos állapotok is. Ha a perturbálatlan gerjesztési energia E_k^0 távol van a két roton kontinuumtól, akkor a kétszeres rotonenergia környezetében az 5.9-ben bevezetett effektív roton—roton csatolás energiafüggésétől eltekinthetünk, azt az $\omega = 2\Delta$ -nál felvett értékével helyettesíthetjük.

$$g_{4\text{eff}}(k) = g_4(k) + \frac{2g_3^2}{2\Delta - E_k^0}, \quad (5.16)$$

így a kétrotonos állapotssűrűség 3.13-as definícióját felhasználva, 2Δ környékén $S(k; \omega)$ a következő alakba írható:

$$S(k; \omega) = A_1^2(k) \left[1 + \frac{A_2(k) \cdot (2\Delta - E_k^0)}{A_1(k) \cdot g_3(k)} \right]^2 \frac{4g_3^2 Q_2(k; \omega)}{(2\Delta - E_k^0)^2}. \quad (5.17)$$

Ennek alapján a neutronszerési spektrumban megjelenő felső ág a kétrotonos állapotssűrűséggel lesz arányos, amelyet 2Δ környékén a $g_{\text{eff}}(k)$ effektív roton—roton csatolás határoz meg. Ha a csupasz roton—roton csatolás $g_4 < 0$, akkor a perturbátlan esetben ($g_3 = 0$ esetén) létrejön a két roton kötött állapota. A $g_3 \neq 0$ esetben a rotonok közötti kölcsönhatást g_4 helyett $g_{4\text{eff}}(k; \omega)$ írja le. A két roton kötött állapota létrejöttének feltétele $g_{4\text{eff}}(k; \omega \sim \Delta) < 0$. Ilyen módon 5.9-et felhasználva a két roton kötött állapota kialakul, ha egyrészt $g_4(k) < 0$, másrészt

$$E_k^0 < 2\Delta - \frac{2g_3^2(k)}{|g_4(k)|}. \quad (5.18)$$

A két roton kötött állapota $S(k; \omega)$ -ban egy, a két roton kontinuum alatti csúcsként jelenik meg az

$$\omega_B = 2\Delta - 2De^{-\frac{1}{2|\theta_{4\text{eff}}|}} \quad (5.19)$$

energiánál, ahol bevezettük a $\hat{g}_{4\text{eff}} = \eta g_{4\text{eff}}(k)$ dimenziómentes csatolást. A két roton kötött állapot az

$$A_1^2(k) \left[1 + \frac{A_2(k)(2\Delta - E_k^0)}{A_1(k)g_3(k)} \right]^2 \left(\frac{2D}{2\Delta - E_k^0} \right)^2 \left(\frac{\hat{q}_3}{\hat{q}_{4\text{eff}}} \right)^2 e^{-\frac{1}{2|\theta_{4\text{eff}}|}} \quad (5.20)$$

erősségű járulékot adja $S(k; \omega)$ -hoz.

A perturbátlan gerjesztési energia értékének növekedésével a rotonok közötti effektív csatolás (5.16) gyengül, a két rotoni kötött állapotnak mind a kötési energiája (5.19), mind a kötött állapotnak a súlya $S(k; \omega)$ -ban (5.20) csökken és az E_k^0 valamilyen értékénél az 5.18-as feltétel már nem teljesül és így a kötött állapot eltűnik.

Amint az 5.13 és 5.14-ből látható, E_k növekedésével a rendszer elemi gerjesztéseinek az energiája E_k egyre jobban eltér a perturbátlan gerjesztési energiától, E_k^0 -tól. Az $\omega = 2\Delta$ energiánál $f(\omega)$ divergál (5.12b) és így 5.13-ból látható, hogy a rendszer elemi gerjesztéseinek az energiája nem haladhatja meg 2Δ -t. A következőkben azt az esetet vizsgáljuk, amikor a perturbátlan gerjesztési energia $E_k^0 \gg 2\Delta$.

Ebben az esetben, mivel az $\omega \sim 2\Delta$ tartományt vizsgáljuk, a rotonok közötti effektív csatolás $g_{4\text{eff}}(k; \omega)$ energiatfüggésétől eltekinthetünk. Ekkor az elemi gerjesztés energiáját az

$$1 + 2\hat{q}_{4\text{eff}} \ln \left| \frac{2\Delta + 2D - \omega}{2\Delta - \omega} \right| = 0 \quad (5.21)$$

egyenlet megoldása adja meg. A megoldás akkor létezik, ha a $\hat{g}_{4\text{eff}}(k)$ negatív. Ekkor a gerjesztési energia:

$$E_k = 2\Delta - 2De^{-\frac{1}{2|\theta_{4\text{eff}}|}}. \quad (5.22)$$

Ez $S(k; \omega)$ -hoz a következő járulékot adja:

$$A_2^1(k) \left[1 + \frac{A_2(k)(2\Delta - E_k^0)}{A_1(k)g_3(k)} \right]^2 \left(\frac{2D}{2\Delta - E_k^0} \right)^2 \left(\frac{\hat{q}_3}{\hat{q}_{4\text{eff}}} \right)^2 e^{-\frac{1}{2|\hat{q}_{4\text{eff}}|}}. \quad (5.23)$$

A csupasz roton—roton csatolás $g_4(k)$ értékétől függően három esetet különböztethetünk meg.

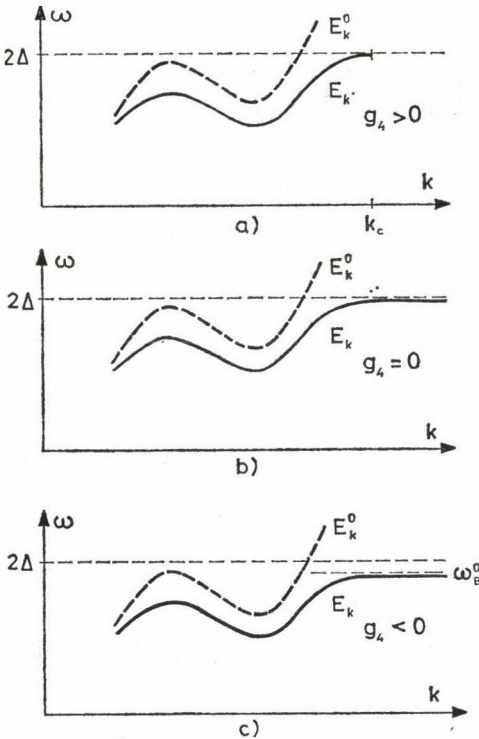
a) $g_4(k) > 0$. Ebben az esetben a $g_{4\text{eff}}(k)$ csatolás, 5.16 alapján csak akkor negatív, ha a perturbálatlan gerjesztési energia

$$E_k^0 < 2\Delta - \frac{2g_3^2(k)}{g_4(k)}. \quad (5.24)$$

Ilyen módon a hullámszám növekedésével (E_k^0 növekedésével) a rotonok közötti effektív csatolás $g_{4\text{eff}}(k)$ gyengül, az elemi gerjesztési spektrum egy k_c véges hullámszám esetén — amit az

$$E_{k_c}^0 = 2\Delta - \frac{2g_3^2(k_c)}{g_4(k_c)} \quad (5.25)$$

egyenlet határoz meg, eléri a kétrotonos kontinuum alját, 2Δ -t, és ezzel véget ér (5.1a ábra). 5.23-ból látható, hogy ennek megfelelően az elemi gerjesztések járuléka $S(k; \omega)$ -hoz k_c felé közeledve eltűnik. Ezt az esetet tárgyalta részletesen *Pitaevskij*[12].



5.1. ábra. Az egyrészecskes és a kétrotonos állapotok közötti kölcsönhatás eredményének jelentkezése az egyrészecskes gerjesztési spektrumban. A vastag szaggatott vonalak a perturbálatlan egyrészecskes gerjesztési energiát jelölik. A folytonos vonalak a kölcsönhatás következtében kialakult gerjesztési spektrumokat írják le a g_4 csatorlási állandó különböző értékei esetén

b) $g_4(k)=0$. Ha a rotonok közötti csupasz csatolás zérus, akkor az effektív csatolás mindig vonzó marad, de E növekedésével gyengül és így az elemi gerjesztési spektrum csak akkor ér véget, amikor $g_3(k)$ eltűnik. ($K > 2k_0$ hullámszámok esetén $g_3(k)$ -nak el kell tűnnie, mert két roton eredő hullámszáma csak $K < 2k_0$ lehet. Ezt az esetet az 5.1b ábrán ábrázoltuk.

c) $g_4(k) < 0$. Ha a csupasz roton—roton csatolás negatív, akkor az 5.13-as egyenlet jobboldala divergál az

$$\omega_B^0 = 2A - 2De^{-\frac{1}{2|\theta_{4\text{err}}|}} \quad (5.26)$$

energiánál, így az elemi gerjesztési spektrum E_k^0 értékének növekedésével aszimptotikusan ω_B^0 -hez tart. (Az előző esethez hasonlóan most is csak a $K < 2k_0$ hullámszámok esetén van értelmezve.) Ezt az esetet mutatja az 5.1c ábra.

Ha az előbbieken kapott eredményeinket megpróbáljuk a szuperfolyékony héliumon végzett neutronszerzési kísérletek adataival összehasonlítani, számos probléma merül fel:

a) A dinamikus struktúra faktor számolásánál feltettük (5.1), hogy az egy sűrűségfluktuációt tartalmazó állapot előállítható a különböző számú „egyrészecske” gerjesztést tartalmazó állapotok lineáris kombinációjaként és számolásunkban ezen belül is csak az egy gerjesztést tartalmazó és a kétrotonos állapotokat vettük figyelembe. A neutronszerzési kísérletek eredményei szerint azonban $S(k; \omega)$ -ban nem csak a két rotonot tartalmazó állapotok jelennek meg, hanem a magasabb energiájú állapotok hatása is jelentős.

b) Amint azt a II.2 fejezetben megmutattuk, ha a dinamikus struktúra faktor a sűrűség—sűrűség korrelációs függvényből számoljuk ki, akkor még abban az esetben is, amikor az egy gerjesztést tartalmazó állapot energiája messze van a több gerjesztést tartalmazó állapotok energiájától, a sűrűség—sűrűség korrelációs függvény egyrészecske közbenő állapotot tartalmazó és proper részei között erős kioltás áll fenn. A fent tárgyalt modellben tulajdonképpen csak az egyrészecske Green-függvény sajátenergiájaként fellépő kétrotonos állapotok megjelenését vizsgáltuk a dinamikus struktúra faktorban. A 2.27-es kifejezésből látható, hogy a kétrotonos állapotok ezen kívül még az F^r proper sűrűség—sűrűség korrelációs függvényben és a A_x sűrűséggerjesztés vertexben is megjelennek és további járulékot adhatnak $S(k; \omega)$ -hoz. A II.2 fejezetben megmutattuk, hogy ezeket a járulékokat az áram—áram korrelációs függvényből érdemes kiszámolni a 2.36-os összefüggés felhasználásával. A következőkben megbecsüljük a proper áram—áram korrelációs függvény legalacsonyabb rendű járulékát $S(k; \omega)$ -hoz.

Az áram operátora (1.4) az a_k hélium atom keltő és eltüntető operátorokkal kifejezve a következő alakú:

$$\vec{J}_k = \sum a_{\vec{p}-\frac{\vec{k}}{2}}^+ a_{\vec{p}+\frac{\vec{k}}{2}} \cdot \frac{\vec{p}}{2m}. \quad (5.27)$$

A b_k kvázirészecske operátorok 2.9-es definícióját felhasználva:

$$\vec{J}_k = \frac{\vec{k}\sqrt{N_0}}{2m} (u_k - v_k)(b_k - b_k^+) + \sum \frac{\vec{p}}{2m} (u_{\vec{p}+\frac{\vec{k}}{2}} v_{\vec{p}-\frac{\vec{k}}{2}} - u_{\vec{p}-\frac{\vec{k}}{2}} v_{\vec{p}+\frac{\vec{k}}{2}}) \quad (5.28)$$

$$(b_{\frac{\vec{k}}{2}-\vec{p}} b_{\frac{\vec{k}}{2}+\vec{p}} - b_{\vec{p}-\frac{\vec{k}}{2}}^+ b_{\vec{p}+\frac{\vec{k}}{2}}^+),$$

ahol elhagytuk a $b_k^+ b_k$ típusú tagokat, mivel feltevésünk szerint az alapállapotot nem tartalmaz kvázirészecske gerjesztéseket. A longitudinális áram—áram korrelációs függvényhez (1.8b) a legalacsonyabb rendű proper járulék a következő:

$$\delta F_L(k; t) = i\Sigma \frac{(\vec{p}\vec{k})^2}{2m^2 k^2} (u_{p+\frac{k}{2}} v_{p-\frac{k}{2}} - u_{p-\frac{k}{2}} v_{p+\frac{k}{2}})^2. \quad (5.29)$$

$$\left\{ G_+ \left(\frac{k}{2} + p; t \right) G_+ \left(\frac{k}{2} - p; t \right) + G_- \left(\frac{k}{2} + p; t \right) G_- \left(\frac{k}{2} - p; t \right) \right\},$$

ahol felhasználtuk a kvázirészecske Green-függvény 2.1-es definícióját. Idő szerinti Fourier transzformáltra átvérve és a G kvázirészecske Green-függvényt a 2.24, 2.25-ös pólusközelítéssel alakokkal helyettesítve, az energia szerinti integrál elvégzése után 2.26 felhasználásával a következő járulékot kapjuk $S(k; \omega)$ -hoz:

$$\begin{aligned} \delta S(k; \omega) = \\ = \Sigma \frac{(\vec{p}\vec{k})^2}{2m^2 k^2} (u_{p+\frac{k}{2}} v_{p-\frac{k}{2}} - u_{p-\frac{k}{2}} v_{p+\frac{k}{2}})^2 Z_1 \left(\frac{k}{2} + p \right) Z_1 \left(\frac{k}{2} - p \right) \cdot \delta(\omega - E_{\frac{k}{2}+p} - E_{\frac{k}{2}-p}). \end{aligned} \quad (5.30)$$

Mivel a hullámszám szerinti összegezést csak a k_0 roton hullámszám környezetében levő állapotokra kívánjuk elvégezni, azaz $\left| \frac{\vec{k}}{2} \pm \vec{p} \right| \sim k_0$, ezért az u_k, v_k együtthatókat k_0 körül sorbafejtjük. Csak az el nem tűnő tagot tartva meg:

$$\delta S(k; \omega) = \frac{A}{8m^2 \omega^2} \frac{1}{k_0^4} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} (\vec{k}\vec{p})^4 \delta(\omega - E_{\frac{k}{2}+p} - E_{\frac{k}{2}-p}), \quad (5.31)$$

ahol

$$A = \left(Z_1(k) \cdot k \cdot \frac{1}{u_k} \frac{\partial v_k}{\partial k} \right)_{k=k_0}^2. \quad (5.32)$$

Érdemes megjegyezni, hogy 5.32-ben az integrál alatti kifejezés a $(\vec{k}\vec{p})^4$ kinematikai faktorban különbözik a perturbálatlan kétrotonos állapotsűrűség 3.15-ös kifejezésétől. Vizsgáljuk először azt az esetet, amikor a két roton eredő hullámszáma közel zérus. Ekkor $\frac{k^2}{4\mu_0} \ll \omega - 2\Delta$ esetén 5.32-ből a következő járulékot kapjuk:

$$S(k; \omega) = \frac{A}{5} \frac{k^4}{(2m\omega)^2} \varrho_2^{(0)}(k=0; \omega). \quad (5.33)$$

Látható, hogy a várakozásnak megfelelően (F9) a két rotont tartalmazó állapotok kis hullámszámok esetén k^4 -es arányos járulékot adnak $S(k; \omega)$ -hoz, és $S(k; \omega)$ a kétrotonos állapotsűrűséggel arányos. Más a helyzet a nagy hullámszámok esetén.

Ekkor $0 < \omega - 2\Delta \ll \frac{k^2}{4\mu_0}$ esetén 5.32 a következő járulékot adja:

$$\delta S(k; \omega) = A \left(\frac{\mu_0}{m} \right)^2 \left(\frac{\omega - 2\Delta}{\omega} \right)^2 \varrho_2^{(0)}(k; \omega). \quad (5.34)$$

A szabad kétrotonos állapotsűrűség $\varrho_2^{(0)}(k; \omega) k \neq 0$ esetén (3.42) a kétszeres roton-energia környezetében energiától független konstans. Ekkor 5.17-el ellentétben a kétrotonos állapotok járuléka már nem a kétrotonos állapotsűrűséggel lesz arányos, hanem megjelenik egy $(\omega - 2\Delta)^2$ faktor. Ez azt jelenti, hogy az áram—áram korrelációs függvény proper része — legalábbis a perturbációs számítás legalacsonyabb rendjében — a kétszeres rotonenergia környezetében egy aránylag éles energiafüggéssel rendelkező $(\omega - 2\Delta)^2$ -el arányos járulékot ad $S(k; \omega)$ -hoz. Ezen tag amplitúdójának becsléséhez a fenomenologikusan felvett u_k, v_k együtthatók ismeretére lenne szükség. Ahhoz pedig, hogy a proper áram—áram korrelációs függvény magasabb rendű (a rotonok közötti kölcsönhatást is tartalmazó) járulékait, illetve az áram-egyrészecske vertexből adódó járulékokat is kiszámoljuk, a szuperfolyékony héliumnak egy jól kezelhető mikroszkopikus elméletére lenne szükség.

c) Ha a rotonok közötti effektív kölcsönhatás vonzó, akkor az 5.19 kifejezés által adott energiánál megjelenik a két roton kötött állapota. Ha pl. $g_{4\text{eff}} \sim -6 \cdot 10^{-3} \text{ meV} \cdot \text{nm}^3$, akkor $k = k_0$ hullámszámnál a dimenziómentes csatolás értéke $g_{4\text{eff}} \approx -0,1$ az ennek megfelelő két roton kötött állapot kötési energiája $2\Delta - \omega_B \approx \approx 10^{-3} \text{ meV}$. Ez az érték lényegesen kisebb, mint a neutronszerzési kísérleteknél elért $0,2 - 0,3 \text{ meV}$ energia körüli felbontóképesség és emiatt $S(k; \omega)$ finomabb részleteire a kísérleti adatokból csak közvetve tudunk következtetni.

Az előbb felsorolt nehézségek ellenére a neutronszerzési kísérletek adataiból a következőket vonhatjuk le. Az általunk használt modell alapján, ha a perturbálatlan gerjesztési energia E_k^0 távol van a két roton kontinuumtól, akkor a kétszeres rotonenergia környékén a kétrotonos állapotok járulékát $S(k; \omega)$ -hoz 5.17-es kifejezés adja meg. Modellünkben két paraméter, a g_3 és a g_4 csatolás szerepel. (A perturbálatlan gerjesztési energia E_k^0 a gerjesztési spektrum E_k ismeretében 5.14-ből meghatározható.) Az egyrészecskes és a kétrotonos állapotok közötti kölcsönhatást jellemző $g_3(K)$ csatolás csak a kétrotonos állapotoknak a súlyát szabja meg és a kétszeres rotonenergia környékén $S(k; \omega)$ alakját egyetlen paraméterrel, a $g_{4\text{eff}}(K)$ effektív csatolással írhatjuk le.

Smith és munkatársai [51] a neutronszerzési kísérletek adatai alapján Zawadowski és munkatársai [32] modelljéből kiindulva — amely az általunk tárgyalt modell egy speciális esete ($A_2(K) = 0$) — meghatározták a $g_3(K)$ és a $g_4(K)$ csatolások értékeit széles hullámszámtartományban. Az általuk kapott $g_3(K)$ és $g_4(K)$ csatolások értékeiből 5.16 felhasználásával meghatároztuk a $g_{4\text{eff}}(K)$ csatolás értékét. Annak ellenére, hogy a felhasznált csatolások nagyon erős hullámfüggést mutattak (annak következtében, hogy nem csak a kétrotonos, hanem a több gerjesztést tartalmazó állapotokat is a kétrotonos állapotokhoz tartozóknak tekintették a $g_3(k)$ és a $g_4(k)$ csatolásokra egyrészt nagy, másrészt erősen k függő értékeket kaptak), az eredményül kapott effektív csatolás közel hullámfüggetlennek adódott és nagyságára $g_{4\text{eff}}(k) \sim -7 \cdot 10^{-3} \text{ meV} \cdot \text{nm}^3$ értéket kaptunk. Véleményünk szerint egyrészt a elvégzett neutronszerzési kísérletek felbontóképességének elégtelen volta, másrészt a modell közelítő jellege — elsősorban a több gerjesztést tartalmazó állapotok figyelmen kívül hagyása — következtében a neutronszerzési kísérletek adataiból egyedül a $g_{4\text{eff}}$ roton—roton csatolásra vonhatunk le következtetéseket.

Az egy gerjesztést tartalmazó és a kétrotonos állapotok közötti kölcsönhatás következtében a $g_{4m=0}(K)$ „csupasz” roton—roton csatolás szerepét az 5.9-el definiált, energiától is függő $g_{4\text{eff}}(k; \omega)$ effektív csatolás veszi át. A neutronszerzési kísérletek adatai alapján megállapíthatjuk, hogy ez a $g_{4\text{eff}}(k; \omega)$ roton—roton csatolás

a kétszeres rotonenergia környezetében vonzó és nagysága nagyon jó egyezésben van a roton energiája és élettartama hőmérsékletfüggésének értelmezéséhez szükséges csatolások értékével. (Könnyen belátható, hogy ha a roton sajátenergia számolásánál a kétrotonos állapotok és az egy gerjesztést tartalmazó állapotok közötti kölcsönkölcsönhatást is figyelembe vesszük, akkor a $g_{4m=0}$ csatolás helyett mindenütt az effektív csatolás 2Δ energia környezetében felvett értéke $g_{4\text{eff}}(k; \omega \sim 2\Delta)$ lép fel [47].)

VI. LEÁRNYÉKOLT POTENCIÁLOK MÓDSZERE

Ahhoz, hogy a rotonok közötti kölcsönhatás tulajdonságairól további következtetéseket vonhassunk le, maguknak a roton gerjesztéseknek a természetét kellene jobban megértenünk. Az alábbiakban tárgyalt roton modell ehhez nyújthat némi segítséget.

A szuperfolyékony hélium elemi gerjesztéseire mikroszkopikus elméletből kiindulva (a hélium atomok közötti potenciál felhasználásával) még nem sikerült konzekvens számolást végrehajtani. Ugyanakkor, a perturbációszámítás aránylag alacsony rendjéig elmenve, a hélium atomok közötti potenciál helyett egy alkalmasan választott modell potenciált választva a fonon—roton spektrumot — például a kollektív változók módszerével — aránylag jól reprodukálni lehet. A választandó modell potenciál abban tér el a hélium atomok közötti ható potenciáltól, hogy az utóbbinak a kis távolságoknál — az elektronfelhők merevsége következtében — fellépő, erősen taszító törzset egy, annál lényegesen gyengébb és sokkal simább távolságfüggéssel rendelkező taszító potenciállal helyettesítjük. Újabban Aldrich és Pines a hélium atomok között a nagy távolságokban a reális potenciállal megegyező, de kis távolságoknál az előbb említett „lágyított” potenciál felhasználásával és egy fenomenologikus vektor—potenciál bevezetésével aránylag egyszerűen reprodukálták a szuperfolyékony hélium fonon—roton gerjesztési spektrumát.

Ebben a fejezetben arra szeretnénk választ adni, hogy egyrészt mi az a fizikai folyamat, amely lehetővé teszi, hogy a hélium atomok törzsének erős taszító potenciálját egy gyengébb „leárnyékolt” potenciállal helyettesítsük, másrészt az Aldrich és Pines által javasolt fenomenologikus vektorpotenciál eredetét szeretnénk megmutatni. Ehhez először röviden ismertetjük a régóta ismeretes ún. leárnyékolt skalárpotenciál módszert [24].

Ha egy egyensúlyi állapotban levő rendszerre egy, a rendszersűrűség-fluktuációhoz csatolódó φ^{ext} skalárpotenciállal leírt külső teret kapcsolunk, akkor ez a rendszerben sűrűségfluktuációkat indukál. Gyenge külső tér esetén a létrejött sűrűség-fluktuáció a lineáris válasz közelítésben:

$$\langle \delta \varrho(k; \omega) \rangle = \chi_{\varrho\varrho}(k; \omega) \varphi^{\text{ext}}(k; \omega), \quad (6.1)$$

ahol $\chi_{\varrho\varrho}$ a rendszer sűrűség—sűrűség válaszfüggvénye. Másrészt, ha a rendszerben sűrűségfluktuációk vannak jelen, akkor ezek a környezetük számára egy polarizációs potenciált jelentenek és így a lokális tér a külső tér és a polarizációs potenciál összege:

$$\varphi^{\text{log}} = \varphi^{\text{ext}} + \varphi^{\text{pol}}. \quad (6.2)$$

A lokális tér és az indukált sűrűségfluktuáció közötti összefüggést a leárnyékolt

sűrűség—sűrűség válaszfüggvény írja le:

$$\langle \delta \varrho(k; \omega) \rangle = \chi_{\varrho\varrho}^{\text{sc}}(k; \omega) \varphi^{\text{lok}}(k; \omega). \quad (6.3)$$

Ha feltesszük, hogy a rendszer sűrűségfluktuációi és az általuk indukált polarizációs potenciál között lineáris kapcsolat áll fenn:

$$\varphi^{\text{pol}}(k; \omega) = f^s(k) \langle \delta \varrho(k; \omega) \rangle, \quad (6.4)$$

ahol $f^s(k)$ írja le, hogy adott sűrűségfluktuáció milyen teret indukál, akkor 6.2 felhasználásával a külső tér és a lokális tér között a következő kapcsolat áll fenn:

$$\varphi^{\text{lok}}(k; \omega) = \frac{\varphi^{\text{ext}}(k; \omega)}{1 - f^s(k) \chi_{\varrho\varrho}^{\text{sc}}(k; \omega)}. \quad (6.5)$$

Ez azt jelenti, hogy a rendszerre csatolt külső teret a rendszer sűrűségfluktuációi leárnyékolják. A rendszer sűrűségfluktuációinak az energiáját az

$$1 = f^s(k) \chi_{\varrho\varrho}^{\text{sc}}(k; \omega) \quad (6.6)$$

egyenlet megoldásai adják. Könnyen belátható, hogy a teljes és a leárnyékolt sűrűség—sűrűség válaszfüggvény között a következő kapcsolat van:

$$\chi_{\varrho\varrho}(k; \omega) = \frac{\chi_{\varrho\varrho}^{\text{sc}}(k; \omega)}{1 - f^s(k) \chi_{\varrho\varrho}^{\text{sc}}(k; \omega)}. \quad (6.7)$$

Könnyen belátható, hogy $T=0$ hőmérsékleten és $\omega > 0$ energiákra a válaszfüggvény és a sűrűség—sűrűség korrelációs függvény pólusai egybeesnek [24]. Így felfoghatjuk úgy is, hogy $\chi_{\varrho\varrho}$ valamilyen „szabad” részecskék sűrűség—sűrűség korrelációs függvénye, amelyek a

$$\tilde{v}(k; \omega) = \frac{f^s(k)}{1 - f^s(k) \chi_{\varrho\varrho}^{\text{sc}}(k; \omega)} \quad (6.8)$$

leárnyékolt potenciállal hatnak kölcsön. Ha az $f^s(k) = V_k$ választással élünk, ahol V_k a rendszer részecskéi között ható potenciál, akkor, ha $\omega \gg \omega_c$, ahol ω ezeknek, a szabad részecskéknek a karakterisztikus energiája $\left(\omega \sim \frac{k^2}{2m} \right.$ nagyságrendű), akkor

$$\chi_{\varrho\varrho}^{\text{sc}}(k; \omega) \approx \frac{Nk^2}{m\omega^2}. \quad (6.9)$$

Ilyen módon, abban az esetben, ha $V_k \frac{Nk^2}{m} \gg \omega_c^2$ akkor a rendszer sűrűségfluktuációinak az energiája 6.6 alapján:

$$\omega_k = k \sqrt{\frac{NV_k}{m}}. \quad (6.10)$$

Ha kis k hullámszámok esetén V_k konstans, akkor 6.10 fononszerű gerjesztések energiáját adja és így a rendszer hosszú hullámhosszú sűrűségfluktuációi a fonongerjesztések. Elektronokból álló rendszer esetén $V_k = \frac{4\pi e^2}{k^2}$, így 6.10 a rendszer

sűrűségfluktuációinak a plazmonoknak az energiáját adja. Ez, az ún. leárnýékolt skalárpotenciál módszere nagyon sikeresen alkalmazható akkor, ha a rendszer részecskéi között hosszú hatótávolságú erő hat (pl. töltött részecskékből álló rendszerek esetében).

A reális héliumra ez a módszer nem jelent sok segítséget, mivel a hélium atomok között ható erő lényeges része a hélium atomok merev taszító törzséből származik, így pl. a hélium atomok között ható $V(\vec{r})$ potenciál Fourier transzformáltjának a létezése is kérdéses.

A szuperfolyékony hélium elemi gerjesztéseinek Feynman—Cohen-féle modellje abból áll, hogy a Feynman-féle „csupasz” gerjesztéseket egy — nagy hullámhosszú sűrűségfluktuációkból álló — felhő veszi körül. Ennek a hatása akkor válik jelentőssé, ha a Feynman-féle gerjesztés hullámhossza összemérhetővé válik az atomok közötti távolsággal. Ez a felhő a gerjesztést körülvevő atomok átrendeződését jelenti a hélium atomok taszító törzsei átlapolódásának elkerülése érdekében. A gerjesztéstől nagy távolságban az atomok átrendeződése leírható úgy is, mint a folyadék egészenek a gerjesztés sebességével ellentétes irányú áramlása.

Klasszikus hidrodinamikából ismert, hogy ha egy merev gömb mozog egy ideális folyadékban, akkor az maga körül egy dipól jellegű sebességteret hoz létre és a tehetetlensége az általa kiszorított folyadék tömegének a felével megnövekszik. Ezzel analóg módon, tegyük fel, hogy a héliumba egy a hélium atommal megegyező, tulajdonságú szennyező atomot helyezünk. Ha ez a szennyező atom a hangsebességhez képest lassan mozog, akkor a klasszikus hidrodinamika szerint a szennyező atomtól nagy távolságban létrejön a folyadéknak a szennyező atom sebességével ellentétes irányú áramlása, a „back-flow”. A létrejövő back-flow két lényeges pontban fog különbözni a klasszikus hidrodinamikai esettől. Egyrészt a szennyező atomot körülvevő atomok egy része a taszító törzsek átlapolódásának elkerülése érdekében a szennyező atommal többé kevésbé együtt fognak mozogni és így a szennyezéstől nagy távolságban létrejövő áramlást a szennyező atom és a „hozzákapcsolt” atomokból álló rendszer hozza létre. Másrészt a szennyező atomtól még nagy távolságra is a folyadék sűrűsége csak közelítőleg marad állandó, a back-flow hosszú hullámhosszú sűrűségfluktuációk eredőjeként jön létre. Ilyen módon azt várjuk, hogy a szennyező atom effektív tömege, amíg a szennyező atom kis sebességgel mozog, a klasszikus értéket lényegesen meghaladja. Növelve a szennyező atom sebességét, egyrészt a környező atomok egyre kevésbé fogják követni a mozgásában, másrészt a back-flow is egyre kevésbé tud kialakulni. Így, ha a szennyező atom sebessége lényegesen meghaladja a hangsebességet, akkor — ha eltekintünk az örvények kialakulásának lehetőségétől — az effektív tömegnek a csupasz tömeghez kell tartania.

Ez a gondolatmenet átvihető a Feynman-féle gerjesztésekre is. A gerjesztett állapot hullámfüggvényéből másodfajú mértéktranszformációval leválaszthatjuk a gerjesztést körülvevő back-flownak hidrodinamikai — tehát potenciáláramlással leírható részét:

$$\psi(m) = \psi'(x)e^{-i\Phi(x)}, \quad (6.11)$$

ahol tehát $\Phi(x)$ írja le a $\psi'(x)$ kvázirészecske által létrehozott back-flow-nak a hidrodinamikai részét, azaz $\Delta\Phi(x)=0$. A $\psi'(x)$ kvázirészecske hullámfüggvény tartalmazza a Feynman-féle gerjesztést és a back-flow-nak a nem hidrodinamikai részét. Ilyen módon a gerjesztett állapot által képviselt áram a következő alakban

írható:

$$\vec{J}(x) = \vec{J}'(x) - \frac{q(x)}{m} \vec{\nabla} \Phi(x), \quad (6.12a)$$

ahol

$$\vec{J}'(x) = \frac{i}{2m} \{ \vec{\nabla} \psi' + X'(x) \psi(x) - \psi'(x) \vec{\nabla} \psi(x) \} \quad (6.12b)$$

a $\psi'(x)$ kvázirészecske által képviselt áram. Ezt a felbontást úgy is értelmezhetjük, hogy a $\psi'(x)$ kvázirészecske egy $\vec{A} = \vec{\nabla} \Phi(x)$ vektorpotenciállal jellemezhető teret hoz létre, és ez a vektorpotenciál jelenti a hidrodinamikai back-flow áramot. Ilyen módon a gerjesztett állapot hullámfüggvényéből a back-flow-t kitranszformálhatjuk és azt mint a $\psi'(x)$ kvázirészecskék által indukált vektorpotenciált, ezen kvázirészecskék közötti kölcsönhatásként kezelhetjük.

Hasonló gondolatmenettel, ahogy azt a skalárpotenciál esetén tettük, a következőképpen járhatunk el. Tegyük fel, hogy a rendszerre egy $\vec{A}^{\text{ext}}(k; \omega)$ külső vektorpotenciált kapcsolunk, amely a rendszer áramfluktuációihoz csatolódik. Ekkor az indukált áramfluktuáció

$$\langle \delta \vec{J}(k; \omega) \rangle = \chi_{JJ}(k; \omega) \vec{A}^{\text{ext}}(k; \omega), \quad (6.13)$$

ahol χ_{JJ} a rendszer áram—áram válaszfüggvénye. Az áramfluktuációk viszont polarizációs vektorpotenciált hoznak létre, így a lokális vektorpotenciál a külső és a polarizációs vektorpotenciál összege

$$\vec{A}^{\text{lok}} = \vec{A}^{\text{ext}} + \vec{A}^{\text{pol}}. \quad (6.14)$$

Az indukált áramfluktuációt a lokális térrel a leárnýékolt áram—áram válaszfüggvény köti össze:

$$\langle \delta \vec{J}(k; \omega) \rangle = \chi_{ee}^{\text{sc}}(k; \omega) \vec{A}^{\text{lok}}(k; \omega). \quad (6.15)$$

Feltesszük, hogy az indukált polarizációs vektorpotenciál a teljes áramfluktuációval arányos:

$$\vec{A}^{\text{pol}}(k; \omega) = f^r(k) \langle \delta \vec{J}(k; \omega) \rangle. \quad (6.16)$$

Ekkor a leárnýékolt és a teljes áram—áram válaszfüggvény között a következő összefüggést kapjuk

$$\chi_{JJ}(k; \omega) = \frac{\chi_{JJ}^{\text{sc}}(k; \omega)}{1 - f^r(k) \chi_{JJ}^{\text{sc}}(k; \omega)}. \quad (6.17)$$

A rendszer áram- és sűrűség-fluktuációit a kontinuitási egyenlet köti össze. Így a kontinuitási egyenlet felhasználásával rövid számolás után a leárnýékolt és a teljes sűrűség—sűrűség válaszfüggvény között a következő összefüggést kapjuk:

$$\chi_{ee}(k; \omega) = \frac{\chi_{ee}^{\text{sc}}(k; \omega)}{1 - \left(f^s(k) + \frac{\omega^2}{k^2} f^r(k) \right) \chi_{ee}^{\text{sc}}(k; \omega)}. \quad (6.18)$$

Az $f^r(k)$ együttható — amely megmutatja, hogy az áramfluktuáció milyen polarizációs vektorpotenciált hoz létre — jelentésének megértésére vizsgáljuk meg, hogy

milyen összszabálynak kell χ_{ee}^{sc} -nek eleget tenni. Ha a leárnýékolt struktúra faktort a következőképpen definiáljuk:

$$S^{sc}(k; \omega) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \chi_{ee}^{sc}(k; \omega) \quad (6.19)$$

akkor a Függelék alapján könnyen belátható, hogy

$$\int_0^\infty \omega S^{sc}(k; \omega) d\omega = \frac{Nk^2}{2m^*(k)}, \quad (6.20)$$

ahol a bevezetett $m^*(k)$ effektív tömeget a következőképpen definiáltuk:

$$m^*(k) = m + f^*(k) N. \quad (6.21)$$

Tehát χ_{ee}^{sc} egy $m^*(k)$ tömegű kvázirészecskék leárnýékolt sűrűség—sűrűség korrelációs függvénye.

Ilyen módon a szuperfolyékony hélium leírható, mint $m^*(k)$ tömegű kvázirészecskék kölcsönható rendszere. Ezek a kvázirészecskék, mivel több atomot foglalnak magukba, nyilvánvaló módon távolról sem olyan merev képződmények, mint egy hélium atom és így ezen kvázirészecskék között ható $U(\vec{r})$ potenciál kis távolságok esetén sokkal kevésbé taszító és kevésbé merev, mint a hélium atomok között ható potenciál.

A fentiekben tárgyalt leárnýékolt potenciálok módszere, bár mikroszkopikus számolás kiindulási alapjaként nem alkalmazható, a szuperfolyékony hélium elemi gerjesztései jellegének megértéséhez némi segítséget jelenthet és kiindulási alapként szolgálhat a gerjesztési spektrum fenomenologikus leírásához [52].

VII. A ROTONOK KÖZÖTTI KÖLCSÖNHATÁS

A II. fejezetben ismertett modell alapján a rotonokat hosszú élettartamú kvázirészecskéknek tekintettük és a közöttük levő kölcsönhatást egy fenomenologikusan felvett Γ_4 vertexel (2.37) írtuk le. Csak az energiahéj közelében levő folyamatokat vizsgáltuk, így eltekintettünk Γ_4 vertexnek az egyes rotonok energiájától és hullámszámának abszolút értékétől való függésétől. Ilyen módon feltételeztük, hogy a rotonok közötti kölcsönhatás csak a rotonok hullámszámai által bezárt szögektől függ. $\Gamma_4 = \Gamma_4(\vartheta; \varphi)$, ahol ϑ a két ütköző roton hullámszáma által bezárt szög.

A két roton eredő hullámszáma $K = 2k_0 \cos \frac{\vartheta}{2}$. A φ szög az ütköző rotonok hullámszámai által kifeszített síknak az ütközés során történő elfordulását jelöli.

A rotonok élettartamát és energiájának hőmérsékletfüggését túlnyomórészt azok a roton—roton ütközések szabják meg, amikor a két roton eredő hullámszáma zérustól különböző. Ekkor a Γ_4 vertexet a φ szög szerint a következőképpen fejtjük ki (2.40):

$$\Gamma_4(k; \omega) = \Sigma g_{4m}(k) e^{im\varphi}. \quad (7.1)$$

A különböző m helicitású kvantumszámmal jellemzett kétrotonos állapotok a roton—roton ütközés során egymástól függetlenül viselkednek. Az egyes m helicitású két-

rotonos állapotban a rotonok közötti kölcsönhatást csak a két roton eredő hullámszámától függő $g_{4m}(k)$ csatolással jellemeztük.

A rotonok élettartamának és energiájuk hőmérsékletfüggésének értelmezéséhez (IV. fejezet) fel kell tételeznünk, hogy legalább hét különböző m helicitású kétrotonos állapothoz tartozó $g_{4m}(K)$ roton—roton csatolás vonzó és $g_{nm}(k) \approx 6 \cdot 10^{-3} \text{ meV} \cdot \text{nm}^3$ körüli érték. Az $m=0$ helicitású kétrotonos állapot tulajdonságairól a héliumon végzett neutronszerelési kísérletek adataiból szerezhetünk információkat. Ahogy azt az V. fejezetben megmutattuk, az $m=0$ helicitású kétrotonos állapotban a kétrotonos állapotok és az egy gerjesztést tartalmazó állapotok közötti kölcsönhatás következtében a rotonok közötti kölcsönhatást már nem a „csupasz” g_{4m} csatolás

jellemzi, hanem a szerepét egy $g_{4\text{eff}} = g_4 + \frac{2g_3^2}{\omega - E_0^k}$ effektív roton—roton csatolás veszi át. A neutronszerelési kísérletek adatai azt mutatják, hogy a nagy hullámszámok tartományában $g_{4\text{eff}}$ vonzó és értéke $6,9 \cdot 10^{-3} \text{ meV} \cdot \text{nm}^3$ körül van. Ez nagyon jó egyezésben van a roton paraméterei hőmérsékletfüggésének értelmezéséhez szükséges csatolások értékével.

Ennek alapján a roton—roton ütközést leíró Γ_4 vertexről (7.1) — ahol tehát $g_{4m=0}$ szerepét $g_{4\text{eff}}$ veszi át — ésszerű azt feltételezni, hogy az $m=0; \pm 2; \pm 4; \pm 6$ helicitású kétrotonos állapotokhoz tartozó g_{4m} csatolások vonzóak és a nagy hullámszámok tartományában $g_{4m}(k) \approx -(6-7) \cdot 10^{-3} \text{ meV} \cdot \text{nm}^3$ körüli értékűek. Tételezzük fel, hogy a Γ_4 vertexnek a k -től és a φ -tól való függése szeparálható:

$$\Gamma_4(k; \omega) = V(k)f(\varphi). \quad (7.2)$$

Ahol az $f(\varphi)$ függvény tulajdonságairól a következőt tételezzük fel:

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} f(\varphi) \cos(m\varphi) = \frac{\eta_m}{7} \quad \text{és} \quad \eta_m = \begin{cases} 1, & \text{ha } m = 0; \pm 2; \pm 4; \pm 6 \\ \ll 1, & \text{ha } m > 6 \end{cases}. \quad (7.3)$$

Ekkor a rotonok közötti kölcsönhatás erősségét leíró $V(k)$ -ről a roton paraméterei hőmérsékletfüggésének értelmezéséhez fel kell tételezni, hogy a nagy hullámszámok tartományában ($k > k_0$) $V(k) \approx -(4-6) \cdot 10^{-2} \text{ meV} \cdot \text{nm}^3$. A rotonok közötti kölcsönhatás (7.3)-ban adott éles szögfüggése azt jelenti, hogy az ütköző rotonok hullámszámai által meghatározott sík a roton—roton ütközés során csak kis mértékben $\varphi < (20-30)^\circ$ fordul el. Könnyen látható, hogy a φ szög azt mutatja meg, hogy mekkora a rotonok közötti hullámszám csere az ütközés során. Ezt q -val jelölve:

$$q \approx 2k_0 \sqrt{1 - \left(\frac{k}{2k_0}\right)^2} \left| \sin \frac{\varphi}{2} \right|. \quad (7.4)$$

Az $f(\varphi)$ 7.3-ban adott tulajdonságai szerint ez azt jelenti, hogy a rotonok közötti kölcsönhatásnál azok a roton—roton ütközések a dominálók, amikor a rotonok közötti hullámszám csere $q \ll 7-9 \text{ nm}^{-1}$, azaz a rotonok közötti kölcsönhatást hosszú hullámhosszú gerjesztések — fononok — közvetítik. Ahogy azt a III. fejezetben megmutattuk (3.46b) a rotonok közötti fonon kicserélődés egy vonzó roton—roton kölcsönhatást jelent. A deformációs potenciál közelítéssel kapott fonon—roton

csatolás értéke (3.31) azonban csak egy $|g_{4l}| < 9 \cdot 10^{-4} \text{ meV} \cdot \text{nm}^3$ erősségű roton—roton csatolást eredményez, amely lényegesen kisebb mint a kívánt érték.

Ha a két roton eredő hullámszám zérus, akkor a Γ_4 vertexet a különböző impulzusmomentumú kétrotonos állapotokhoz tartozó g_{4l} csatolások segítségével a következő alakban állítottuk elő (2.41):

$$\Gamma_4(\vec{k}; -\vec{k}; \vec{k}'; -\vec{k}') = \Sigma g_{4l}(2l+1)P_l(\cos \theta_{\vec{k}; \vec{k}'}), \quad (7.5)$$

ahol $\theta_{\vec{k}; \vec{k}'}$ a \vec{k} és \vec{k}' közötti szöget jelöli. Könnyen látható, hogy a rotonok közötti hullámszám csere a θ szög segítségével a következőképpen fejezhető ki:

$$q \cong 2k_0 \left| \sin \frac{\theta_{\vec{k}; \vec{k}'}}{2} \right|. \quad (7.6)$$

Feltételezhetjük, hogy a rotonok közötti kölcsönhatást a $K=0$ esetben is hosszú hullámszámú gerjesztések közvetítik. Így 7.2-vel analóg módon feltehetjük, hogy $\Gamma_4(k=0; q) \approx V(O)$ ha $q < q_c \sim 7 \text{ nm}^{-1}$. Ekkor $g_{4l} \approx -2V(O) \left(\frac{q_c}{2k_0} \right) \left(\frac{q}{240} \right)$. A fény-szórás kísérletekben megjelenő két roton rezonancia kötési energiájának magyarázatához szükséges $g_{4,l=2} = -7,6 \cdot 10^{-4} \text{ meV} \cdot \text{nm}^3$ csatoláshoz $V(O) \approx -(1,3-1,7) \cdot 10^{-2} \text{ meV} \cdot \text{nm}^3$ körüli értéket kell választanunk. Ez azt mutatja, hogy a rotonok közötti kölcsönhatás erőssége a $K=0$ esetén kb. 1/3-ad része a nagyobb ($k \sim k_0$) hullámszámokhoz tartozó kölcsönhatás erősségének.

A Feynman által adott roton modell szerint a részecske jellegű „csupasz” roton gerjesztés maga körül egy áramlási teret hoz létre. A gerjesztés helyétől nagy távolságban ez az áramlási tér — a back-flow — dipól jellegű. Ilyen módon, ha két roton közötti távolság sokkal nagyobb mint a csupasz rotonokra jellemző karakterisztikus távolság $a_0 \approx \frac{2\pi}{k_0}$ akkor a rotonok közötti kölcsönhatás a következő alakúnak tekinthető fel:

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{A}{m} \left\{ 3 \frac{(\vec{k}_1 \vec{r})(\vec{k}_2 \vec{r})}{r^5} - \frac{(\vec{k}_1 \vec{k}_2)}{r^3} \right\}, \quad (7.7)$$

ahol \vec{k}_1 és \vec{k}_2 a két roton hullámszáma. A kölcsönhatás erősségét leíró A konstans az határozza meg, hogy mekkora a dipólteret létrehozó objektum térfogata. Ha a dipólter egy atom mozgásából származik, akkor a klasszikus hidrodinamika szerint $A = \frac{1}{4\pi\varrho}$ (ϱ a folyadék átlagos sűrűsége). Tételezzük fel, hogy a rotonok közötti kölcsönhatás 7.7 alakú, ha r nagyobb mint valamilyen paraméterként választott a_d távolság ($a_d \cong a_0$), és $\Phi(r)=0$, ha $r < a_d$. Ekkor 7.7 Fourier transzformáltja:

$$\Phi(p) = \frac{4\pi A}{m} \left\{ \frac{1}{3} (\vec{k}_1 \vec{k}_2) - \frac{(\vec{k}_1 \vec{q})(\vec{k}_2 \vec{q})}{q^2} \right\} F(qa_d), \quad (7.8)$$

ahol

$$F(x) = 3 \frac{\sin x - x \cos x}{x^3}. \quad (7.9)$$

Ezt a két roton eredő k hullámszám és a φ szög segítségével a következő alakba írhatjuk:

$$\Phi(k; \varphi) = -\frac{4\pi A k_0^2}{3m} \left\{ 1 - \frac{k^2}{2k_0^2} - 3 \sin^2 \frac{\varphi}{2} \left(1 - \frac{k^2}{4k_0^2} \right) \right\} F\left(2k_0 a_d \sin \frac{\varphi}{2}\right). \quad (7.10)$$

Abban az esetben, ha $2k_0 a_d \sqrt{1 - \left(\frac{k}{2k_0}\right)^2} \gg 1$, akkor $\Phi(k, \varphi)$ -nak a φ szögtől való függését gyakorlatilag az F függvény határozza meg. Ha $a_d \approx 0,5-0,6$ nm körüli érték, akkor — a $K \approx 2k_0$ hullámszám-tartománytól eltekintve — ez az F függvény eleget tesz a rotonok közötti kölcsönhatás φ szögtől való függésére 7.3-ban adott feltételének. 7.10 az egyes m helicitású kétrotonos állapotokhoz tartozó roton—roton csatolásokra a következő értékeket adja:

$$g_{4m} \approx -\frac{\pi A k_0}{ma} \left(1 - \frac{k^2}{2k_0^2} \right). \quad (7.11)$$

Annak ellenére, hogy $g_{4m}(K)$, hasonlóan $\Phi(k; \varphi)$ is $K > \sqrt{2} k_0$ hullámszámok esetén taszítónak válik, kisebb hullámszámok esetén 7.11 egy, a rotonok közötti vonzó kölcsönhatást jelent. Közepes ($k \sim k_0$) hullámszámok esetén a roton—roton csatolások kívánt értékéhez a dipóltér erősségét meghatározó A értékét kb. 10^{-2} nm^3 körülnek kell választanunk. Ez a klasszikus hidrodinamikai modell szerint azt jelenti, hogy a rotonok közötti kölcsönhatást létrehozó dipólteret nem egy, hanem kb. három hélium atom mozgása hozza létre.

Ha a két roton eredő hullámszáma zérus, akkor a rotonok közötti dipóltér

$$g_{4l} \approx \frac{2\pi A}{ma^2} \quad (7.12)$$

erősségű roton—roton csatolást jelent. A két roton rezonancia kötési energiájának magyarázatához az $a \sim 0,5-0,6$ nm esetén $A \approx (3-4) \cdot 10^{-3} \text{ nm}^3$ értékűnek adódik. Ez azt jelenti, hogy ha a két roton kötött állapotot $K=0$ esetén a 7.10-ben adott dipóltér hozza létre, akkor a dipóltér erőssége a $K \neq 0$ esettel ellentétben olyan, mintha az azt létrehozó csupasz roton csak egy atomot tartalmazna.

Eltekintve attól, hogy a dipóltér erősségét megszabó A konstans értékét különböznek kell választanunk $k=0$ és $k \neq 0$ esetén, a rotonok közötti kölcsönhatás Feynman-féle modelljével szemben a következő kifogás emelhető: Feltételezzük, hogy a rotonok közötti kölcsönhatás dipól jellegű, ha a rotonok közötti távolság nagyobb mint egy paraméterként választott a_d és zérus, ha a rotonok közötti távolság kisebb mint a_d . Ez az utóbbi feltétel nyilvánvalóan erősen vitatható, mivel a Feynman-féle roton modell alapján azt várjuk, hogy a „csupasz” részecske jellegű roton gerjesztések között kis távolságok esetén egy nagyon erős, várhatóan taszító jellegű kölcsönhatás lép fel. A rotonok közötti kölcsönhatás 7.3-ban adott szögből való függéséhez ezen „hard-core” potenciál karakterisztikus hosszát szintén $0,5-0,6$ nm körülnek kell választanunk. Ilyen módon ez 7.10-hez hozzáadva lényegében csak az A konstans értékének (esetleg előjelének) megváltozásához vezet.

Összefoglalva: a rotonok közötti kölcsönhatásról a következőket tetelezhetjük fel. A rotonok közötti kölcsönhatást túlnyomórészt hosszú hullámszámú gerjeszté-

sek közvetítik. Ezen kölcsönhatáshoz és egyúttal a „csupasz” roton gerjesztésekhez is egy 0,5—0,6 nm körüli karakterisztikus hossz rendelhető. Ez egyezésben van a VI. fejezetben ismertetett modellel, amely szerint az egyrészesce jellegű „csupasz” roton gerjesztés több (2—3) hélium atomot foglal magába, illetve azt, hogy a back-flow létrehozásában több atom vesz részt. A rotonok közötti kölcsönhatás vonzó jellegű és erőssége a két roton eredő hullámszámának függvényében lassú, a dipól—dipól kölcsönhatással ellentétes változást mutat.

ÖSSZEFOGLALÁS

A disszertációban a szuperfolyékony hélium sajátos gerjesztései, a rotonok közötti kölcsönhatásnak a vizsgálatát tűztük ki célul. A rotonok közötti kölcsönhatás vizsgálata két szempontból tarthat számot fokozottabb érdeklődésre. Egyrészt a kísérleti eredmények azt mutatják, hogy a szuperfolyékony hélium kinetikai tulajdonságait $T > 1$ K hőmérsékleten a rotonoknak az egymással való ütközése határozza meg. Másrészt a rotonok zérus körüli csoportsebességgel rendelkeznek, így ha két roton ütközik, akkor azok hosszú ideig egymás közelében maradnak. Ennek eredményeképpen fellépő intenzív végállapot-kölcsönhatás következtében tetszőlegesen gyenge, vonzó, jellegű kölcsönhatás a két roton rezonancia fellépéséhez vezet.

Mivel magáról a roton gerjesztésről csak eléggé hiányos képpel rendelkezünk, ezért a rotonok közötti kölcsönhatás tulajdonságairól ezen kölcsönhatás következményeinek a vizsgálatával próbáltunk felvilágosítást szerezni. A II. fejezetben ismertetett modellel alapján a rotonokat hosszú élettartamú kvázirészecskének tekintve a rotonok közötti kölcsönhatást egy paraméterként felvett Γ_4 vertexel jellemeztük (2.37). Csak az energiahéj környezetében levő kétrotonos folyamatokat vizsgáltuk, ezért a Γ_4 vertexnek az egyes rotonok energiájától és hullámszámának abszolút értékétől való függésétől eltekintettünk. Ilyen módon feltételeztük, hogy a rotonok közötti kölcsönhatás csak a rotonok hullámszamai által bezárt szögektől, vagy másképpen csak a két roton eredő K hullámszámától és az ütközés során történő hullámszám cserétől függ. A roton diszterzió speciális alakja miatt a roton—roton ütközés során a különböző impulzusmomentumú kétrotonos állapotok $K \neq 0$ esetén egymással keverednek, ezért külön tárgyaltuk a $K=0$ és a $K \neq 0$ eseteket.

Ha a két roton eredő hullámszáma zérus, akkor a különböző impulzusmomentumú kétrotonos állapotok egymástól függetlenül viselkednek és az egyes l impulzusmomentumú kétrotonos állapotban a rotonok közötti kölcsönhatást a g_4 roton—roton csatolásokkal jellemeztük (2.41). A III. fejezetben megmutattuk, hogy a héliumon végzett fényszórási kísérletekben megjelenő két roton rezonancia fellépése azt mutatja, hogy $g_{4,l=2} = -7,6 \cdot 10^{-4} \text{ meVnm}^3$ értékű. Az egyéb l kvantumszámokhoz tartozó g_{4l} csatolásokról a fényszórási kísérletekből nem nyerhető felvilágosítás. A III.3 fejezetben a rotonok és a fononok közötti kölcsönhatást vizsgáltuk meg. Megmutattuk, hogy a rotonok közötti fonon kicserélődés vonzó jellegű roton—roton kölcsönhatás fellépéséhez vezet. A rotonok energiájának a folyadék sűrűségétől való függésének ismeretében, deformációs potenciál közelítésben kiszámoltuk a roton—fonon kölcsönhatás erősségét és megmutattuk, hogy a két roton rezonancia kísérletileg mért kötési energiája a — rotonok közötti fonon kicserélődési mechanizmussal — csak anomálishan nagy $k_c \sim 10 \text{ nm}^{-1}$ levágási hullámszám esetén magyarázható. Ez azt mutatja, hogy — legalábbis deformációs potenciál közelítés-

ben — a rotonok közötti kölcsönhatás nem írható le hosszú hullámszámú fononok cseréjével. A két roton rezonancia két fononra való bomlása a két roton rezonanciának — az egyes rotonok élettartamától független — véges élettartamához vezet. Megmutattuk, hogy a két rotont tartalmazó állapotnak a két fononra való bomlása leírható két harmadrendű roton—fonon vertex segítségével. Megmutattuk, hogy egy gyengén kölcsönható Bose rendszer esetén a két roton—fonon vertexet jellemző csatolás erőssége megegyezik. Feltételezve, hogy ez az erősen kölcsönható Bose rendszerként tekinthető héliumban is érvényes marad, a két roton rezonancia véges élettartamát deformációs potenciál közelítéssel kapott fonon—roton csatolások segítségével értelmezni tudtuk.

A rotonok élettartamát és energiájának hőmérsékletfüggését a kísérleti adatok szerint a rotonok egymással való ütközése határozza meg. A rotonok Γ szélessége (az élettartam reciproka) a termikusan gerjesztett rotonok számával arányos (4.3) és a Δ rotonenergia a rotonok számával arányosan csökken (4.5). A IV. fejezetben a rotonok élettartamának és energiájának hőmérsékletfüggését a roton sajátenergia számolásával határoztuk meg. Ha a két roton eredő hullámszáma $K \neq 0$, akkor a különböző m helicitású kétrotonos állapotok egymástól függetlenek lesznek és a roton sajátenergia előállítható az egyes m kvantumszámmal jellemzett M_m sajátenergiák összegeként (4.7). Az egyes m helicitású kétrotonos állapotban a rotonok közötti kölcsönhatást a csak két roton eredő hullámszámától függő $g_{4m}(k)$ roton—roton csatolásokkal írtuk le (2.45). Megmutattuk, hogy a roton—roton ütközésnél fellépő végállapotkölcsönhatás következtében a rotonok közötti kölcsönhatás nem tárgyalható Born közelítésben, hanem két roton egymáson való tetszőleges számú szóródásának lehetőségét is figyelembe kell venni. Megmutattuk, hogy az egyes m csatornákhöz tartozó M_m roton sajátenergia a nagy csatolás határesetében egy, g_{4m} -től független, véges értékhez tart (4.13).

A rotonok élettartamát a roton sajátenergia képzetes része határozza meg. Az egyes m csatornákból eredő $\text{Im } M_m$ -re egy, a roton—roton csatolás értékétől független felső korlátot állapítottunk meg (4.18). Ez azt mutatja, hogy egy adott csatornával a kísérletileg mért roton szélességnek csak 1/4-ed része írható le. $\text{Im } M_m$ -nek a g_{4m} roton—roton csatolás értékétől való függése (4.3. ábra) azt mutatja, hogy a gyenge csatolás határesetében $\text{Im } M_m$ a Hartree—Fock közelítésnek megfelelően g_{4m}^2 -el arányosan növekszik, de nagyobb csatolások esetén egy véges értékhez tart. Ennek oka az, hogy $\text{Im } M_m$ a kétrotonos állapotsűrűségnek a két roton kontinuumban ($\omega > 2\Delta$) felvett értékével arányos. A vonzó roton—roton csatolás a kétrotonos állapotokat az alacsonyabb energiájú állapotok felé tolja el és 2Δ alatt létrejön a két roton kötött állapot. A roton—roton csatolás erősségének növelésével az állapotok egyre nagyobb hányada a két roton kontinumból a két roton kötött állapotba megy át. Nagy csatolások esetén a kétrotonos állapotsűrűség a két roton kontinuumban $\frac{1}{g_{4m}^2}$ -el csökken és így $\text{Im } M_m$ egy véges értékhez tart.

A rotonenergia hőmérsékletfüggését (4.1. ábra) a roton sajátenergia reális része határozza meg. Az egyes m csatornákhöz tartozó sajátenergia reális részére 4.20-ban egy, a g_{4m} csatolástól független felső korlátot adtunk. Ennek alapján egy adott m helicitás kvantumszámhoz tartozó $\text{Re } M_m$ sajátenergia a kísérletileg mért rotonenergia hőmérsékletfüggésének csak kb. 1/6-od részét képes leírni. $\text{Re } M_m$ -nek a g_{4m} roton—roton csatolás erősségétől való függését vizsgálva (4.4. ábra) megállapítottuk, hogy $\text{Re } M_m$ a Hartree—Fock közelítésnek megfelelően a gyenge csatolás

határesetében lineárisan indul, de a csatolás erősségét növelve ($g_{4m} < 0$ esetén) $\text{Re } M_m$ a Hartree—Fock közelítéstől eltérve előjelet vált és nagy csatolások esetén egy véges pozitív értékhez tart, amely a rotonenergiának a hőmérséklettel való növekedését jeleneténé. Megmutattuk, hogy $\text{Re } M_m$ a kétrotonos állapotsűrűségnek a kétrotonos kontinuum alatti és feletti értékének különbségével arányos. Vonzó roton—roton csatolás esetén a csatolás erősségének növelésével a kétrotonos állapotok egyre nagyobb része megy át a 2Δ alatti energiájú két roton kötött állapotba és ez okozza $\text{Re } M_m$ előjelváltását.

A roton sajátenergia tulajdonságai alapján a roton paraméterei kísérletileg mért hőmérsékletfüggésének értelmezéséhez fel kell tételeznünk, hogy legalább 6—7 különböző m helicitású kétrotonos állapothoz tartozó g_{4m} roton—roton csatolás vonzó és kb. $-6 \cdot 10^{-3} \text{ meV} \cdot \text{nm}^3$ erősségű.

Az V. fejezetben megvizsgáltuk, hogy a kétrotonos állapotok hogyan jelennek meg a szuperfolyékony héliumon végzett neutronszerzési kísérletekben. Feltételezve, hogy az egy sűrűségfluktuációt tartalmazó állapot előállítható az egy gerjesztést tartalmazó állapotok és a két rotont tartalmazó állapotok lineáris kombinációjaként (5.2) a dinamikus struktúra faktorra egy egyszerűen modellt állítottunk fel. Megmutattuk, hogy a neutronszerzési kísérletekben csak az $m=0$ helicitási kétrotonos állapotok jelennek meg. Ha az egy gerjesztést tartalmazó állapotoknak a kétrotonos állapotokkal való kölcsönhatását egy $g_3(k)$ csatolással jellemezzük, akkor ahogy azt 5.16-ban megmutattuk, az $m=0$ helicitású kétrotonos állapotban a rotonok közötti

g_{4m} roton—roton csatolás szerepét egy $g_{4\text{eff}}(k; \omega) = g_{4m=0} + \frac{2g_3^2(k)}{\omega = E_k^0}$ effektív roton—

roton kölcsönhatás veszi át. Megmutattuk, hogy egyrészt a modellünk közelítő jellege, másrészt a neutronszerzési kísérletek felbontóképességének elégtelen volta következtében a dinamikus struktúra faktorból csak a $g_{4\text{eff}}(k) = g_{4\text{eff}}(k; \omega = 2\Delta)$ értéke határozható meg. A neutronszerzési kísérletek adatai alapján a nagy hullámszámok tartományában azt találtuk, hogy $g_{4\text{eff}}$ közel hullámszámtól független és kb. $-6,9 \cdot 10^{-3} \text{ meV} \cdot \text{nm}^3$ értékű, ami nagyon jó egyezésben van a roton paraméterei hőmérsékletfüggésének értelmezéséhez szükséges csatolások értékével.

Megvizsgáltuk azt, hogy az egy gerjesztést tartalmazó állapotok és a kétrotonos állapotok közötti kölcsönhatás hogyan módosítja a szuperfolyékony hélium elemi gerjesztési spektrumát. Megmutattuk, hogy az elemi gerjesztési spektrum csak akkor éri el a kétszeres rotonenergiát egy adott kritikus hullámszámnál (amint azt Pitaevskij feltételezte), ha a rotonok közötti $g_{4m=0}$ csatolás pozitív ebben a hullámszám tartományban. Ha $g_{4m=0} = 0$, akkor a gerjesztési spektrum asszimptotikusan 2Δ -hoz tart és ha $g_{4m=0}$ negatív, akkor a gerjesztési spektrum asszimptotikusan egy, a kétszeres rotonenergia alatti energiához tart (5.1 ábra).

Egy kölcsönható Bose rendszer tulajdonságait vizsgálva megmutattuk, hogy a sűrűség—sűrűség korrelációs függvény egy kvázirészecske közbenső állapotot tartalmazó és az egy kvázirészecske közben állapotot nem tartalmazó — proper — részei nem tekinthetők egymástól függetleneknek. Megmutattuk, hogy a proper sűrűség—sűrűség korrelációs függvény és a sűrűség—egyrészecske vertex még az energiahéjtól távoli energiák esetén is a $k \rightarrow 0$ határesetben egymással megegyező, de ellentétes előjelű járulékot ad a sűrűség—sűrűség korrelációs függvényhez. Emiatt a dinamikus struktúra faktort célszerűbb az áram—áram korrelációs függvényből számolni 2.35 segítségével. A több gerjesztést tartalmazó állapotoknak az áram—áram korrelációs függvény proper és nem proper részéből jövő járulékai

már nem oltják ki egymást és ilyen módon legalábbis a perturbációs számítás alacsony rendjében lehetőség nyílik a dinamikus struktúra faktor kiszámolására. Az V. fejezetben megbecsültük a két rotonot tartalmazó állapotoknak a proper áram—áram korrelációs függvényből adódó járulékát $S(k; \omega)$ -hoz. Megmutattuk, hogy ez a két-rotonos állapotossűrűségtől lényegesen eltérő, a kétszeres rotonenergia környezetében $(\omega - 2\Delta)^2$ -el arányos járulékot ad $S(k; \omega)$ -hoz (5.34).

A VI. fejezetben a roton természetnek és a rotonok közötti kölcsönhatás jobb megértése céljából megvizsgáltuk és értelmeztük a Pines által javasolt rotonok között fellépő vektorpotenciál eredetét. Megmutattuk, hogy ha a „csupasz” rotongerjesztés által létrehozott back-flow hidrodinamikai áramlással leírható részét egy mérték-transzformációval a „csupasz” roton hullámfüggvényéhez hozzacsatoljuk, akkor az ilyen módon felöltöztetett rotonok közötti egy vektorpotenciállal leírható kölcsönhatás is fellép. Megmutattuk, hogy ha a roton körül kialakuló back-flow létrehozásában nem csak egy, hanem több atom is részt vesz, azaz a „csupasz” roton nem csak hatás is fellép. Megmutattuk, hogy ha a roton körül kialakuló back-flow létrehozása egy hélium atomot tartalmaz, hanem a „központi” mozgó atomot körülvevő atomok egy része többé kevésbé mereven követi azt a mozgásában, akkor érthetővé válik az, hogy az így felöltöztetett kvázirészecskék közötti kölcsönhatás sokkal lágyabb, mint a hélium atomok merev taszító törzsei következtében az egyes atomok között fellépő potenciál.

A VII. fejezetben összefoglaltuk a rotonok közötti kölcsönhatásról szerzett ismereteinket. Megállapítottuk, hogy a rotonok közötti kölcsönhatás azt a két roton eredő hullámszámától függetlenül vonzó jellegű és azt hosszú hullámhosszú gerjesztések közvetítik. Megállapítottuk, hogy a rotonok közötti kölcsönhatás karakterisztikus távolsága, illetve a „csupasz” rotongerjesztés mérete kb. 0,5—0,6 nm körüli, vagy ennél valamivel nagyobb érték. A rotonok közötti kölcsönhatás erőssége $K=0$ esetén kb. $1/2—1/3$ -ad része a nagyobb hullámszámoknál mutakozó kölcsönhatás erősségének. Ez az irányfüggés is alátámasztja a Pines által javasolt, a rotonok között fellépő vektorpotenciál létezését.

A Feynman—Cohen modell alapján a rotonokat körülvevő back-flow dipólterrel közelíthető és így ennek alapján a rotonok közötti kölcsönhatásnak is a dipólok közötti kölcsönhatás jellemzőit kellett mutatnia. Megmutattuk, hogy a rotonok közötti kölcsönhatás nem írható le dipólterek segítségével. Az a tény, hogy a rotonok közötti kölcsönhatásra a dipóltérnél lényegesen gyengébb (és más típusú) irányfüggést kaptunk, kérdésessé teszi a Feynman—Cohen-féle rotonmodell érvényességét.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Mindenekelőtt köszönettel tartozom a Központi Fizikai Kutató Intézet vezetésének és különösen a Szilárdtest-elméleti Osztály kutató kollektívájának állandó bátorításukért a jó légkörért, mely az értekezésben foglalt eredmények elérését lehetővé tette.

Külön köszönetet szeretnék mondani *Zawadowski Alfréd*-nek, aki erre a témára felhívta a figyelmemet és témavezetőként nagy segítséget nyújtott munkám során.

Köszönetemet fejezem ki *Szépfalussy Péter*-nek és *Rácz Zoltán*-nak a kézirat gondos áttekintésért és kritikai megjegyzéseikért.

A disszertáció gondos gépeléséért köszönetet mondok *Balczer György*-nének.

FÜGGELÉK

A szuperfolyékony hélium gerjesztési spektrumát lassú neutronok szórásával lehet meghatározni. Ahogy azt *Van Hove*, *Feynman* és *Cohen* [5] megmutatta, annak valószínűsége, hogy egységnyi idő alatt egy neutron k momentumot és ω energiát ad át a rendszernek

$$W(k; \omega = AS(k; \omega), \quad (F1)$$

ahol az A konstans a neutron hélium atom kölcsönhatást tartalmazza és $S(k; \omega)$ a folyadék dinamikus struktúra faktora, amely a rendszer sűrűségfluktuációit írja le. Definíciója:

$$S(k; \omega) = - \int_0^\infty dt e^{-i\omega t} \langle [\rho_k(t) \rho_k^+(0)] \rangle. \quad (F2)$$

A dinamikus struktúra faktor az 1.6-ban definiált sűrűség—sűrűség korrelációs függvényből $T=0$ hőmérsékleten a következőképpen kapjuk meg [24]:

$$S(k; \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im } F(k; \omega > 0). \quad (F3)$$

A dinamikus struktúra faktor és a struktúra faktor között a következő kapcsolat áll fenn:

$$\int_0^\infty S(k\omega) d\omega = NS(k). \quad (F4)$$

Ha egy rendszerben az atomok között csak sebességfüggetlen erők vannak, akkor a következő, *Nozieres* és *Pines* [25] által meghatározott összszabály teljesül:

$$\int_0^\infty S(k; \omega) d\omega = \frac{Nk^2}{2m}. \quad (F5)$$

Említést érdemel még egy nevezetes összefüggés, az ún. kompresszibilitási összszabály:

$$\lim_{k \rightarrow 0} \int_0^\infty d\omega \frac{S(k; \omega)}{\omega} = \frac{N}{2mc^2}, \quad (F6)$$

ahol c a hangsebesség.

A dinamikus struktúra faktor tulajdonságainak részletes vizsgálatát szuperfolyékony héliumra *Miller*, *Pines* és *Nozieres* [27] végezte el. Amint az a Feynman képből is következik, a szuperfolyékony héliumban az egyedüli alacsony energiájú gerjesztett állapotai a hosszú hullámhosszú sűrűségfluktuációk a fononok. Ezért a $S(k; \omega)$ két részre bontható fel:

$$S(k; \omega) = NZ(k)\delta(\omega - E_k) + S^II(k; \omega), \quad (F7)$$

ahol $Z(k)$ az E_k energiájú egyrészecskés gerjesztések járuléka, míg $S^II(k; \omega)$ a magasabb energiánál megjelenő több részecskés, például többfononos állapotok járuléka. Ha az egyrészecskés gerjesztések élettartama véges, akkor a $\delta(\omega - E_k)$ helyett egy Lorentz görbe jelenik meg, de a kísérleti adatok szerint a fonon—roton gerjesztési spektrum nagyon jól definiált, azaz energiához képest nagyon hosszú élettartamú állapotoknak felel meg. Mivel a $k \rightarrow 0$ esetben az $E_k = ck$ energiájú fonongerjesztések a rendszer legalacsonyabb gerjesztett állapotai, emiatt az összszabályokból azonnal adódik, hogy egyrészecskés gerjesztések önmagukban kielégítik az összszabályokat, azaz

$$\lim_{k \rightarrow 0} Z(k) = \frac{k}{2mc}. \quad (F8)$$

Ebből következik, hogy a több részecskés állapotok járulékait tartalmazó $S^II(k; \omega)$ a $k \rightarrow 0$ határesetben

$$\lim_{k \rightarrow 0} S^II(k; \omega) \propto k^4. \quad (F9)$$

IRODALOM

1. *F. London*, Superfluids. John Wiley, New York, 1954.
L. M. Khalatnikov, Theory of Superfluids. Benyamin, New York, 1965.
R. J. Donnelly, Experimental Superfluidity. University of Chicago, 1967.
J. Wilks, The Properties of Liquid and Solid Helium. Clarendon Press, Oxford, 1967.
J. S. Brooks, *R. J. Donnelly*, J. Phys. Chem. Ref. Data 6, 51, 1977.
2. *L. D. Landau*, J. Phys. USSR 5, 71, 1974 és 11, 91, 1947.
3. *R. P. Feynman*, Phys. Rev. 91, 1301, 1953 és 94, 262, 1954.
4. *R. P. Feynman*, *M. Cohen*, Phys. Rev. 102, 1189, 1956.
5. *M. Cohen*, *R. P. Feynman*, Phys. Rev. 107, 13, 1957.
6. *H. Palevsky*, *K. Otnes*, *K. E. Larsson*, *R. Pauli*, *R. Stedman*, Phys. Rev. 108, 1346, 1957.
H. Palevsky, *K. Otnes*, *K. E. Larsson*, Phys. Rev. 112, 11, 1958.
K. E. Larsson, *K. Otnes*, Arkiv. Fysik 15, 49, 1959.
J. L. Yarnell, *G. P. Arnold*, *P. J. Bendt*, *E. C. Kerr*, Phys. Rev. 113, 1379, 1959.
P. J. Bendt, *R. D. Cowan*, *J. L. Yarnell*, Phys. Rev. 113, 1386, 1959.
D. G. Henshaw, *A. D. B. Woods*, Phys. Rev. 121, 1266, 1961.
7. *N. N. Bogoljubov*, J. Phys. USSR 11, 23, 1947.
8. *J. Gavoret*, *Ph. Nozieres*, Annals of Physics (N. Y.) 28, 348, 1964.
9. *I. Kondor*, *P. Szépfalusy*, Acta Phys. Hung. 24, 81, 1968.
10. *O. Penrose*, *L. Onsager*, Phys. Rev. 104, 577, 1956.
T. D. Lee, *K. Huang*, *C. N. Yang*, Phys. Rev. 106, 1135, 1957.
K. A. Bruckner, *K. Sawada*, Phys. Rev. 106, 1117, 1957.
W. E. Parry, *D. ter Haar*, Annals of Physics (N. Y.) 19, 496, 1962.
P. C. Hohenberg, *P. C. Martin*, Annals of Physics (N. Y.) 34, 291, 1965.
B. H. Brandow, Annals of Physics (N. Y.) 64, 21, 1971.
D. Bohm, *B. Salt*, Rev. Mod. Phys. 39, 894, 1967.
11. *L. Landau*, *I. M. Khalatnikov*, Collected Papers of L. D. Landau (Pergamon Press).
12. *L. P. Pitaevskij*, Zh. Eksperim. i Teor. Fiz. 36, 1168, 1959. és Usp. Fiz. Nauk 88, 409, 1966.
13. *R. A. Cowley*, *A. D. B. Woods*, Can. J. Phys. 49, 177, 1970.
A. D. B. Woods, *R. A. Cowley*, Rept. Prog. in: Physics 36, 1135, 1973.
A. D. B. Woods, *E. C. Svensson*, *P. Martel*, Phys. Letters 43A, 223, 1973.
14. *T. J. Greytak*, *J. Yan*, Phys. Rev. Letters 22, 987, 1969.
T. J. Greytak, *R. Woerner*, *J. Yan*, *R. Benjamin*, Phys. Rev. Letters 25, 1547, 1970.
T. J. Greytak, *R. L. Worner*, J. Phys. (Paris) Cl—269, 1972.
R. L. Woerner, *T. L. Greytak*, J. Low Temp. Phys. 13, 149, 1973.
15. *J. Ruwals*, *A. Zawadowski*, Phys. Rev. Letters 25, 333, 1970.
16. *F. Iwamoto*, Progr. Theoret. Phys. (Kyoto) 44, 1135, 1970.
17. *N. N. Bogoljubov*, *D. N. Zubarev*, Zh. Eksperim. i Teor. Fiz. 28, 129, 1959.
18. *S. Sunakawa*, *S. Yamsaki*, *T. Kebukawa*, Progr. Theoret. Phys. (Kyoto) 41, 919, 1969 és 44, 565, 1970.
19. *E. Feenberg*, Theory of Quantum Fluids. Academic Press, New York, 1969.
20. *A. A. Abrikosov*, *L. P. Gorkov*, *I. E. Dzyaloshinski*, Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics
21. *N. M. Huygenholtz*, *D. Pines*, Phys. Rev. 116, 489, 1959.
22. *S. T. Beliaev*, Zh. Eksperim. i Teor. Fiz. 34, 417, 1958. és 34, 433, 1958.
23. *H. W. Jackson*, *E. Feenberg*, Annals of Physics 15, 266, 1958. és Reviews of Mod. Phys. 34, 686, 1962.
D. K. Lee, *H. W. Jackson*, *E. Feenberg*, Annals of Physics 44, 84, 1967; *E. Feenberg*, American J. Phys. 38, 684, 1970; *H. W. Jackson*, Phys. Rev. A8, 1529, 1973. és A9, 964, 1974; .
24. *D. Pines*, *Ph. Nozieres*, The Theory of Quantum Liquids. Benjamin, 1966.
25. *W. Götze*, *M. Lücke*, Phys. Rev. B13, 3822, 1976. és 3825, 1976.
26. *A. D. B. Woods*, *V. F. Sears*, Phys. Rev. Letters 39, 415, 1977.
27. *A. Miller*, *D. Pines*, *Ph. Nozieres*, Phys. Rev. 127, 1452, 1962.
28. *A. Bijl*, Physica 7, 869, 1940; *R. Jastrow*, Phys. Rev. 98, 1479, 1955; *D. K. Lee*, *E. Feenberg*, Phys. Rev. 137, A731, 1965; *W. L. Mcmillan*, Phys. Rev. 138, 442, 1965.; *L. Reatto*, *G. V. Chester*, Phys. Rev. 155, 88, 1967.; *D. Schiff*, *L. Verlet*, Phys. Rev. 160, 208, 1967.; *W. E. Parry*, *C. R. Rathbone*, Proc. Phys. Soc. 91, 273, 1967.; *W. E. Massey*, *C. W. Woo*, Phys. Rev. 164, 256, 1967.; *C. E. Campbell*, *E. Feenberg*, Phys. Rev. 188, 396, 1969.; *W. P. Francis*, *G. V. Chester*, *L. Reatto*, Phys. Rev. A1, 86, 1970.

29. *W. H. Keeson, K. W. Taconis*, *Physica* 4, 28, 1937.
30. *E. C. Kerr, R. D. Taylor*, *Annals of Physics* 26, 292, 1964.; *C. Boghosian, H. Meyer*, *Phys. Rev.* 152, 200, 1966. és 163, 206, 1967.; *D. L. Goodstein, J. S. Brooks, R. J. Donnelly, P. H. Roberts*, *Phys. Letters* 54A, 281, 1975.; *R. J. Donnelly, P. H. Roberts*, *J. Low Temp. Phys.* 27, 687, 1977.
31. *I. A. Fomin*, *Zh. Eksperim. i Teor. Fiz.* 60, 1178, 1971.
32. *A. Zawadowski, J. Ruvalds, J. Solana*, *Phys. Rev.* A5, 399, 1972.
33. *J. Solana, V. Celli, J. Ruvalds, I. Tüttő, A. Zawadowski*, *Phys. Rev.* A6, 1685, 1972.
34. *A. D. B. Woods, P. A. Hilton, R. Scherm, W. G. Stirling*, *J. Phys. C* 10, L. 45, 1977.
35. *J. W. Halley*, *Phys. Rev.* 181, 338, 1969.
36. *M. J. Stephen*, *Phys. Rev.* 187, 279, 1969.
37. *A. Zawadowski*, KFKI preprint, 1978.
38. *S. Baereswyl, J. Jäckle*, *Helv. Physica Acta* 44, 554, 1971.; *L. P. Pitaevskij, I. A. Fomin*, *Zh. Eksperim. i Teor. Fiz.* 65, 2516, 1973.
39. *R. L. Woernier, M. J. Stephen*, *J. Phys. C* 8, L 464, 1975.
40. *C. A. Murray, R. L. Woerner, T. J. Greytak*, *J. Phys. C* 8, L 90, 1975.
41. *O. W. Dietrich, E. M. Graf, C. H. Huang, L. Passel*, *Phys. Rev.* A5, 1377, 1972.
42. *T. J. Greytak, J. Yan*, *Proc. 12th Int. Conf. on Low Temp. Phys. Kyoto*, 1970.
43. *Mezei Ferenc* szóbeli közlése.
44. *J. Maynard*, *Phys. Rev.* B14, 3868, 1978.
45. *J. Yau, M. Stephen*, *Phys. Rev. Lett.* 27, 482, 1971.
46. *K. Nagai, K. Nojima, A. Hatano*, *Prog. Theor. Phys. (Kyoto)* 47, 355, 1972.
47. *J. Ruvalds*, *Phys. Rev.* B3, 3556, 1971.
48. *I. Tüttő*, *J. Low Temp. Phys.* 11, 77, 1973.
49. *K. Nagai*, *Prog. Theor. Phys. (Kyoto)* 49, 46, 1973.
50. *F. Iwamoto*, *Prog. Theor. Phys. (Kyoto)* 44, 1121, 1970.
51. *I. Tüttő, A. Zawadowski*, *J. Phys. C* 11, L 385, 1978.
52. *A. J. Smith, R. A. Cowley, A. D. B. Woods, W. G. Stirling, P. Martel*, *J. Phys. C* 10, 543, 1977.
53. *C. H. Aldrich III, D. Pines*, *J. Low. Temp. Phys.* 25, 677, 1976.

MEGOLVADÁSI ÉS MEGSZILÁRDULÁSI PROBLÉMÁK PLAZMASZÓRÁSNÁL*

GROMA ISTVÁN

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

1. Bevezetés	363
2. A plazmaláng fizikai tulajdonságai	364
3. Por felmelegedése a plazmalángban	365
3.1. Hőátadás a plazmából	365
3.2. A megolvadási probléma egyenletei	365
3.3. Közelítő megoldások	366
4. Por—szubsztrát kölcsönhatás	369
4.1. A megszilárdult por átmérőjének meghatározása	369
4.2. Hőmérsékletviszonyok a szubsztrátban és a bevonatban	370
5. Összefoglalás	372

1. BEVEZETÉS

A plazmaszórás technológiai szempontból a klasszikus lángszórás továbbfejlesztett változatának tekinthető. Az utóbbi 30 évben egyre kiterjedtebben használják, főleg különböző korróziógátló, illetve kopásálló bevonatok készítésére.

Míg a lángszórásban kémiai reakcióval keletkező hő fűti a lángot, a plazmaszóráskor a betáplált elektromos energia hatására a gáz ionizálódik, így plazma állapot alakul ki. A hőmérséklet a szokásos esetekben 10^4 nagyságrendű. Ez jóval nagyobb, mint a lángszóráskor elérhető hőmérséklet.

A magas hőmérséklet következménye, hogy magas olvadáspontú anyagok, pl. Al_2O_3 is szórhatók ezzel a technológiával.

A szórás folyamata röviden a következőképpen foglalható össze. A plazmagenerátorból kb. $800 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ sebességgel áramlik ki a részlegesen ionizált gáz, amely többnyire Ar és H_2 , illetve N_2 és H_2 gáz keveréke. Ebbe általában oldalról juttatják be a felszórando anyagot por formájában. A porszemcsék mérete $10\text{--}15 \mu\text{m}$ között változhat. Ezt a gyorsan áramló gáz magával ragadja és felgyorsítja mintegy $200 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ sebességre. Közben felmelegszik, szerencsés esetben megolvad. Ezután a por a hideg céltárgyra csapódik, ahol újra megszilárdul és valamilyen kötés alakul ki közte és a szubsztrátum között.

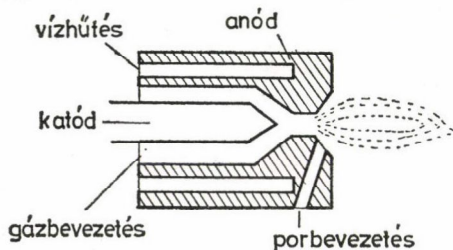
A fentiekből látható, hogy a két talán legfontosabb kérdés az, hogy mennyire olvad meg a porszemcske a plazmában, illetve hogyan hűl le, amikor eléri a szórando felületet. A következőkben ezen folyamatok leírására szolgáló elméleteket foglaljuk össze [1], [2] alapján.

* Érkezett: 1985. január 8.

2. A PLAZMALÁNG FIZIKAI TULAJDONSÁGAI

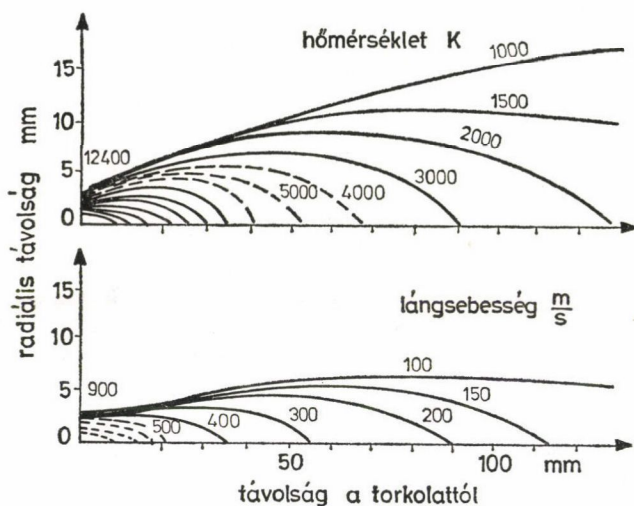
Mielőtt rátérnénk a por megolvadásának problémájára, röviden bemutatjuk a plazmalángban kialakuló hőmérséklet és sebességviszonyokat, mivel ezek döntően befolyásolják a por mozgását és megolvadását a plazmában.

A generátorban (1. ábra) az anód és a katód között ívkisülés alakul ki. A két elektróda közötti feszültség 30–80 V, a betáplált teljesítmény 30–50 kW között változik. Amint az jól ismert, az ívnek három tartománya különíthető el, az anód-esés, a pozitív oszlop, vagy plazma és a katód-esés tartománya. A középső plazma lényegében elektromosan semleges, a feszültség a másik két tartományon esik.



1. ábra.

Szokásos plazmagenerátor sematikus rajza



2. ábra. Hőmérséklet és sebességviszonyok N_2-H_2 plazmalángban

Az ívkisülés hatására a gáz gyorsan felmelegszik, így nagyon kitérül és kb. $800 \frac{m}{s}$ sebességgel áramlik ki a fúvókából. A gáz szétterülve lehül és sebessége egyre kisebb lesz. Nagyszámú szerző [3–6] vizsgálta különböző módszerekkel a kialakuló hőmérséklet és sebességviszonyokat. Egy tipikus mérési eredmény látható a 2. ábrán N_2-H_2 plazma esetén [3]. Azonnal szembetűnő, hogy a gáz sebessége és hőmérséklete igen erősen függ a helytől. Tehát a gázon végigfutó porszemcsét körülvevő közeg hőmérsékleti és áramlási sebessége erőteljesen változik. Ez a körülmény igen megnehezíti a por mozgását és felmelegedését leíró elmélet kiépítését.

3. POR FELMELEGEDÉSE A PLAZMALÁNGBAN

3.1. Hőátadás a plazmából

A porszemcsébe egységnyi idő alatt egységnyi felületen beáramló hőenergia arányos a plazmalángnak a por helyén levő hőmérsékletnek és a por felületi hőmérsékletének különbségével:

$$q = \alpha(T_g - T_s), \quad (1)$$

ahol T_g a plazma, T_s pedig a por felületének hőmérséklete. Az α az ún. hőátadási tényező.

Az α értékéről a következőket mondhatjuk [7]. Bevezetve az

$$Nu = \frac{2\alpha R}{K_g}$$

ún. Nusselt számot (R a porszem sugara K_g a plazma hővezető képessége) hasonló-sági megfontolások felhasználásával felírhatjuk az

$$Nu = 2 + 0.6 Re^{1/2} \cdot Pr^{1/3} \quad (2)$$

összefüggést, ahol Re a Reynolds szám ($Re = \rho_g |v_g - v_p| \times 2R / \eta_g$) és Pr a Prandtl szám ($Pr = C_g \eta_g / K_g$), itt ρ_g a plazma sűrűsége, η_g a plazma viszkozitása, C_g a plazma fajhője és $|v_g - v_p|$ a plazma és a por sebességének különbsége.

Mivel a plazma összes, a Nusselt számban szereplő paramétere erősen függ a hőmérséklettől [4]. Az

$$\alpha = \frac{Nu K_g}{2R}$$

hőátadási tényező is erőteljesen függ a hőmérséklettől, ezért általában be kell vezetni $\bar{\alpha}$ átlagos hőátadási tényezőt.

3.2. A megolvadási probléma egyenletei

Az összes modell alapvető feltevése, hogy a poron belül a hő csak hővezetés útján terjed, ha a por bizonyos része megolvad, akkor sem veszi figyelembe, hogy itt konvekció is létrejöhet. Ez az elhanyagolás nagyban egyszerűsíti a problémát, de pl. a por átolvadási idejére nyilván nagyobb időt szolgáltat, mint ami a valóságban szükséges.

További fontos feltevés, hogy az egész felmelegedési probléma gömbszimmetrikusnak tekinthető.

Ezután vizsgáljuk meg milyen egyenletek írják le a problémát. Amíg a por felületi hőmérséklete kisebb a T_m olvadási pontnál, egy egyszerű gömbszimmetrikus hővezetési problémával állunk szemben, tehát

$$\rho_{p,s} c_{p,s} \frac{\partial T}{\partial t} = r^{-2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \cdot K_{p,s} \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (3)$$

ismert hővezetési egyenletet kell használni, ahol $C_{p,s}$, $\rho_{p,s}$, $K_{p,s}$ rendre a por fajhője, sűrűsége és hővezetőképessége szilárd halmazállapotban. A felületen beáramló

hőre (1) alapján a

$$K_{p,s} \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R} = \alpha(T_g - T_s) \quad T_s < T_m \quad (4)$$

egyenletet kapjuk.

Abban a pillanatban, amikor a felületi hőmérséklet eléri az olvadáspontot, a külső rész elkezd megolvadni és egy sokkal bonyolultabb, kétfázisú rendszer alakul ki. A szilárd tartományban továbbra is (3) írja le a hővezetést, a folyékony tartományban pedig a hasonló alakú

$$\varrho_{p,l} c_{p,l} \frac{\partial T}{\partial t} = r^{-2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 K_{p,l} \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (5)$$

egyenlet, ahol az l index a folyadékfázis paramétereit jelzi. A (4) határfeltételi egyenlet most

$$K_{p,l} \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R} = \alpha(T_g - T_s) \quad T_s > T_m \quad (6)$$

alakú lesz. Végezetül az olvadási front helyén kell megadnunk a határfeltételeket. Jelölje $R_m(t)$ a belső szilárd mag sugarát az idő függvényében. A megolvadáshoz szükséges L látens hőt az olvadási front felületén be és kiáramló hő különbsége fedezi, ezért felírhatjuk, hogy

$$K_{p,s} \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R_{m-0}} - K_{p,l} \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R_{m+0}} = L \varrho_p \frac{\partial R_m}{\partial t} \quad (7)$$

Természetesen az olvadási front helyén a hőmérsékletnek meg kell egyeznie az olvadási ponttal, így

$$T(R_m(t), t) = T_m. \quad (8)$$

A (3)–(8) egyenletek egyértelműen meghatározzák a hőmérsékleteloszlást a porrészecskén belül.

3.3. Közelítő megoldások

A poron belüli hőmérséklet időfüggésének leírására a probléma nagyfokú bonyolultsága következtében eddig semmilyen megoldás nem született. Különböző közelítések mellett több szerző is adott becsléseket arra vonatkozólag, hogy milyen feltételek esetén olvad meg teljesen a plazmalángon áthaladó porszemcse.

Az egyik lehetséges eljárás [8] feltételezi, hogy a poron belül nincs hőmérséklet gradiens, továbbá a plazmaláng hőmérséklete T_g nem függ a helytől a céltárgy és a generátor torkolata közötti X távolságon belül.

Ekkor a megolvadáshoz szükséges t idő alatt a felvett hő (1) felhasználásával

$$Q = \alpha \pi D^2 T_g \quad (9)$$

(itt $D=2R$ a por átmérője). A Nusselt számot (2)-ből 2-nek vehetjük, így

$$\alpha = \frac{2 \cdot K_g}{D}.$$

Mivel a poron belül a hőmérséklet állandó a megolvadásig felvett hő

$$Q = \frac{\varrho_p \cdot \pi D^2}{6} (C_p T_m + L). \quad (10)$$

A (9) és (10) egyenlőségéből az olvadáshoz szükséges t_m idő kiszámítható.

A porrészecske nyilván akkor tud megolvadni, ha a plazmában a tartózkodási ideje nagyobb a t_m időnél.

A tartózkodási idő egyszerűen kiszámítható, ha feltételezzük, hogy a részecskére az állandó

$$F = 3\pi D \eta_g V_g$$

Stokes erő hat, így állandó gyorsulással mozog. Egyszerű számolás után azt kapjuk, hogy a por akkor olvad meg, ha

$$X > \frac{D^2 (C_p T_m + L)^2 \varrho_p}{16} [V_g \eta_g (K_g T_p) -^2]. \quad (11)$$

Ez a formula igen sok plazmára jellemző paramétert tartalmaz, ezért így nehezen vethető össze a tapasztalattal. Azonban ha ugyanolyan plazmaparaméterek mellett 2 különböző anyagot szórunk és feltételezzük, hogy mindkettő éppen megolvad amikor eléri a szórandó felületet, (11)-ből egy jól használható összefüggést származtathatunk le, amely szerint

$$\frac{D_2}{D_1} = \frac{\varrho_{p1}^{1/2} (C_{p,2} T_{m,1} + L_1)}{\varrho_{p2}^{1/2} (C_{p,2} T_{m,2} + L_2)}$$

teljesülése szükséges ahhoz, hogy az egyik anyag megolvadása esetén a másik is megolvadjon.

A kapott eredmény elég jó egyezést mutat a tapasztalattal, de csak korlátozott információkat nyújt.

Pontosabb leírást kapunk [9], ha az előző modellben használt (7) összefüggés helyett (1)-et használjuk, tehát figyelembe vesszük, hogy a hőátadás csökken, ahogy kezd felmelegedni a porszemcse. Ez azt jelenti, hogy a

$$4R^2 \pi \alpha (T_g - T) = \frac{d}{dt} \left(\frac{4\pi}{3} R^3 C_p \varrho_p T \right) \quad (12)$$

összefüggést kell használni, amikor $T \neq T_m$ -mel. Ha $T = T_m$, akkor

$$4\pi R^2 \alpha (T_g - T_m) t_m^x = \frac{4\pi}{3} R^3 \varrho_p L_p, \quad (13)$$

ahol t_m^x jelöli azt az időt, amíg lejátszódik a halmazállapotváltozás.

Természetesen itt is feltételeztük, hogy a poron belül a hőmérséklet állandó és a plazmaláng hőmérséklete nem függ a helytől.

A (12) és (13)-ból kiszámítható, hogy mennyi idő alatt melegszik fel a por egy $T_p > T_m$ hőmérsékletre.

$$t_{ks} = \frac{K_p R^2}{3K_g \chi_p} \ln \left[\frac{T_g - T_p(0)}{T_g - T_p} \right] + \frac{\varrho_p R L}{3K_g (T_g - T_m)}, \quad (14)$$

ahol $\chi_p = \frac{K_p}{\varrho_p C_p}$ az ún. hődiffúziós állandó.

Ez a modell nyilván csak akkor használható, ha teljesül az a feltevés, hogy a poron belül a hőmérsékletgradiens kicsi. Ez csak akkor igaz, ha a poron belüli hőkiegyenlítődhöz szükséges idő t_{ha} jóval kisebb, mint t_{ks} .

A [10] szerint, ha egy porszemcse felületi hőmérsékletét hirtelen T_s -re változtatjuk, akkor az r helyen a t időpillanatban a hőmérséklet

$$\frac{T(r, t)}{T_s} = 1 + \frac{2R}{\pi r} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \times \sin \left(\frac{n\pi r}{R} \right) \exp \left(- \left(\frac{n\pi}{R} \right)^2 \chi_p t \right).$$

Így numerikus számolással megkapható, hogy az ahhoz szükséges idő, hogy a por középpontjában a hőmérséklet elérje a T_s 90%-át

$$t_{ha} = 0.3 R^2 / \chi_p. \quad (15)$$

Így a modell csak akkor használható, ha (14) és (15)-ből

$$\frac{1}{3} \frac{K_p}{K_g} \ln \left[\frac{T_g - T_p(0)}{T_g - T_p} \right] \gg 0.3.$$

Megjegyezzük, hogy ez a feltétel pl. az egyik gyakran használt anyagra, az Al_2O_3 -ra nem teljesül.

A por mozgását is pontosabban írjuk le a plazmában, ha a Stokes törvénybe a relatív sebességet írjuk be, így a mozgásegyenlet

$$\frac{4\pi}{3} R^3 \varrho_p \dot{v}_p = 6\pi R \eta_g |v_g - v_p|. \quad (16)$$

Ennek megoldása

$$v_p(t) = v_g \left[1 - \exp \left(-6\pi \eta_g R / \left(\frac{4\pi}{3} R^3 \varrho_p \right) t \right) \right] \quad (17)$$

V_p^x -gal jelölve a pornak a céltárgyba csapódási sebességét, (17)-ből a pornak a céltárgyhozéréséhez szükséges t_{dw} idő kiszámolható.

A (14) t_{hs} és a (17)-ből kapott t_{dw} összevetéséből adódik, hogy a por akkor olvad meg a plazmában, ha

$$\frac{2\varrho_p \chi_p}{9\eta_g} \ln \left(\frac{V_g}{V_g - V_p^x} \right) > \frac{1}{3} \frac{K_p}{K_g} \left[\frac{T_g - T_p(0)}{T_g - T_m} \right] + \frac{\chi_p \varrho_p L}{3K_g (T_p - T_m)}.$$

Megállapíthatjuk, hogy a kapott eredmény bizonyos speciális esetekben lehetőséget nyújt annak megbecslésére, hogy milyen feltételek mellett érhető el a plazmalángon áthaladó porszemcse átolvadása.

4. POR—SZUBSZTRÁT KÖLCSÖNHATÁS (MEGSZILÁRDULÁS)

Az előzőekből látható, hogy a plazmaláncan áthaladó por csak bizonyos esetekben olvad át teljesen. A szubsztrátra érkező csak részlegesen, vagy egyáltalán nem megolvadt por csak nagyon porózus, rosszul kötődő bevonatot hoz létre. A teljesen megolvadt por ellenben lapos koronggá torzul és nagy, mintegy $10^5 - 10^6 \text{ K s}^{-1}$ hűlési sebességgel megszilárdul. Ekkor sokkal jobb minőségű bevonat jöhet létre. Mivel gyakorlati szempontból csak ez az utóbbi eset játszik fontos szerepet, a megszilárdulási modellek csak teljesen megolvadt részecskékre vonatkoznak.

Alapvetően két kérdésre keresünk választ. Az egyik, hogy milyen átmérőjű lesz a szubsztrátra csapódó, ott korong alakúvá szétterülő porszemcse, a másik, hogy milyen esetekben érhető el az, hogy a forró porrészecske megolvassza a szubsztrát felületét. Ugyanis a tapasztalat szerint ekkor válik a szórt réteg erősen kötötté.

4.1. A megszilárdult por átmérőjének meghatározása

A korong alakúra szétkenődött porrészecske méretének jellemzésére *Madejski* bevezette [11] a

$$\xi_m = \frac{2}{D} \sqrt{\frac{A}{\pi}}$$

menyiséget, ahol D a porszemcse kezdeti átmérője, A pedig a kialakult korong területe. Az általa kidolgozott elméletből ez a ξ_m határozható meg.

Figyelembe veszi, hogy egyszerre két folyamat játszódik le, egyrészt a felületre érkező porszemcse folyamatosan megszilárdul, másrészt folyamatosan szétterül.

A megszilárdulás az ún. Stefan-probléma megoldása segítségével írható le, amely megmutatja, hogy a megszilárdulási front helye az idő függvényében:

$$y = U \sqrt{\chi_p t},$$

ahol U egy bonyolult transzszendens egyenletből meghatározható állandó.

A szétterülés leírására az energiamegmaradás törvénye használható fel.

$$\frac{d}{dt} (E_k + E_s + E_f) = 0.$$

E_k a még folyékony állapotban levő rész kinetikus energiája, E_s a felület energiája és E_f a folyadékon belüli belső sűrűdés által disszipálódott energia.

Ezek felhasználásával a korong átmérőjének időfüggésére egy nemlineáris másodrendű differenciálegyenlet adódik. Abban az esetben, amikor a megszilárdulás sokkal lassabban játszódik le, mint a porszemcse szétterülése, amely általában teljesül, ξ_m -re a

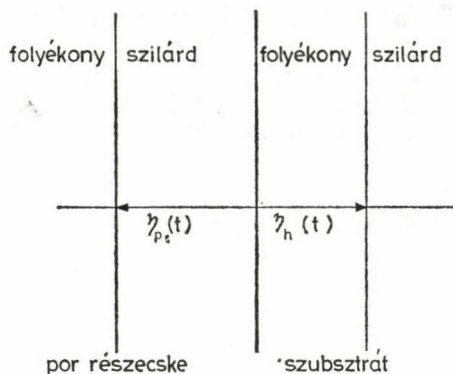
$$\frac{3\xi_m^2}{We} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\xi_m}{1.2941} \right)^5 = 1$$

egyenlet adódik. A $We = \rho_p D v_p^2 / \sigma$ a Weber szám, σ a felületi feszültség.

A kapott eredmény kísérletileg nehezen ellenőrizhető, de néhány kísérlet szerint jól használható.

4.2. Hőmérsékletviszonyok a szubsztrátban és a bevonatban [12]

A következőkben arra a kérdésre keressük a választ, hogy milyen feltételek mellett érhető el, hogy a szubsztrát felülete megolvad. Feltételezzük, hogy a részecske már szétterült a felületen. A poron belül jelölje η_p a szilárd és folyékony fázis határának helyét. Ugyanez a szubsztráton belül legyen η_{hp} (3. ábra), (p a porrészecskét, h a szubsztrátot, s a szilárd fázist, l a folyadék fázist jelöli).



3. ábra. Olvadási és megszilárdulási front helyzete a szubsztrát és porrészecske határfelületének közelében

A hőmérsékletnek a hely függvényében a következőket kell kielégítenie:

$$T(-\infty, t) = T_p \quad (18)$$

$$T(\infty, t) = T_h,$$

tehát a végtelenben a hőmérséklet megegyezik a por, illetve a céltárgy eredeti hőmérsékletével. Mind a négy tartományban a hő hővezetéssel terjed, így

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \chi_i \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad (19)$$

ahol χ_i a megfelelő hődiffúziós állandó.

A folyadék és a szilárd fázis határfelületén mindkét közegben az olvadáshoz szükséges, illetve a fagyáskor felszabaduló hő a felületen ki és beáramló hő különbségével egyenlő (ugyanúgy, mint (5)-nél):

$$K_{i,s} \frac{\partial T}{\partial x} (\eta_i(t)) - K_{i,l} \frac{\partial T}{\partial x} (\eta_i(t)) = \rho_i L_i \dot{\eta}_i \quad (20)$$

és

$$T(\eta_i(t), t) = T_{im} \quad i = p, h, \quad (21)$$

ahol L_h a szubsztrát anyagának olvadáshője L_p a por megszilárdulásakor felszabaduló hő.

A részecske és a szubsztrát határán ki és beáramló hőnek egyenlőnek kell lennie, azaz

$$K_{p,s} \frac{\partial T}{\partial x}(0, t) = K_{h,l} \frac{\partial T}{\partial x}(0, t). \quad (22)$$

A (18)–(22) összefüggések teljesen meghatározzák a probléma megoldását. Az egyes tartományokban a megoldást

$$T = A_i \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\chi_i t}}\right) + B_i$$

alakban kereshetjük. Behelyettesítés után

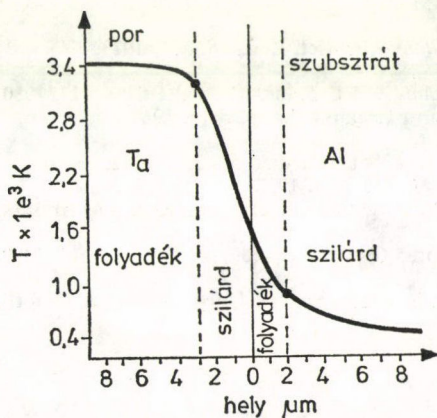
$$\eta_p = U_p \sqrt{\chi_{p,s} t}$$

$$\eta_h = U_h \sqrt{\chi_{h,l} t}$$

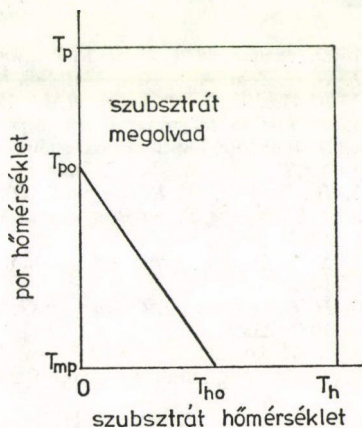
adódik, ahol az A_i , B_i , U_i paraméterek egy bonyolult egyenletrendszeret elégítenek ki.

Egy tipikus hőmérsékleteloszlást mutat a 4. ábra. Megvizsgálva a T_p és T_h függvényében a szubsztrát megolvadásának feltételét, érdekes eredmény adódik. Egy koordináta-rendszer egyik tengelyére felmérve T_h -t, a másikra T_p -t (5. ábra), berajzolható egy háromszög, amin kívül eső hőmérsékletpárra megolvad a céltárgy, belül esőre nem. A háromszög csúcsaihoz tartozó kritikus hőmérsékleteket T_{h0} -al és T_{p0} -al jelölve, az 1. táblázatban különböző anyagok esetén feltüntettük ezeket a kritikus értékeket. Az No jel esetén sohasem, a \square jel esetén mindig megolvad a céltárgy felülete.

Ezzel a táblázattal egy a plazmaszórás szempontjából igen fontos eredményre jutottunk.



4. ábra. Tipikus hőmérsékleteloszlás a szubsztrát és a bevonat határának közelében



5. ábra. A háromszögön kívül eső T_h és T_p pontpárok esetén a szubsztrát megolvad

1. TÁBLÁZAT
Különböző anyagpárok esetén a kritikus T_{h0} és T_{p0} értékek

$T_p(K)$ $T_{s0}(K)$		Részecske						
		Cr	Ni	Nb	Mo	Ta	Ti	W
Szubsztrátum	Al	□	1842	□	□	□	3185	□
		66	□	□	□	399	□	□
	Cu	3633	3907	3696	3261	4576	6115	□
		745	953	395	237	600	1088	□
	Cr	■	No	4291	3722	4795	No	□
		1162	910	1220	□	□	□	□
	Fe	3222	No	3080	□	3801	4813	□
		1099	283	513	1584	□	□	□
	Ti	2946	No	□	□	3364	■	□
		1205	□	□	138	□	□	□

5. ÖSSZEFOGLALÁS

Összefoglalva megállapíthatjuk, hogy a porrészecske plazmában történő megolvadására kidolgozott elméletek csak nagyon speciális esetekben adnak kielégítő eredményt. Ugyanakkor a por és a szubsztrát kölcsönhatását leíró modellek a gyakorlat számára fontos információkat nyújtanak.

IRODALOM

1. D. Apelian, M. Paliwal, R. W. Smith, W. F. Schilling, Int. Met. Rev., 28, 271, 1983.
2. S. H. Zaat, Ann. Rev. Mat. Sci. 13, 9—42, 1983.
3. A. Vardelle, I. M. Baronnet, M. Vardelle, P. Fauchais, IEEE Trans. Plasma. Sci., 8, 417, 1980.
4. W. Lochte-Holtgreven ed., Plasma Diagnostics, North Holland, Amsterdam, 1968.
5. A. Vardelle, Doktori disszertáció, Limoges, 1979.
6. M. T. Mechetoglu, F. Kitzinger, W. H. Gauwin, Rev. Sci. Instrum., 53, 285, 1982.
7. W. E. Ranz, W. R. Marshall, Clem. Eng. Prog, 48, 141, 173, 1952.
8. J. L. Engelhe, Paper Prezentid at Meeting of American Institute of Chemical Eng., Los Angeles, 1962.
9. S. M. Honben, Proc. 9th International Thermal Spray Conference (ed. A. Vardell et al.), 1980. 143.
10. H. C. Carslaw., I. C. Jaeger: Conduction of heat in solids, Oxford University Press, Oxford, 1959. 233.
11. S. Madejski, Int. J. Heat. Mass. Trans. 19, 1003, 1976.
12. S. Dallaine, Thin Sol. Film, 95, 237, 1982.

LÉZER INDUKÁLT ATOMMAG ÁTMENETEK*

KÁLMÁN PÉTER

Budapesti Műszaki Egyetem, Fizikai Intézet,
Kísérleti Fizika Tanszék, H—1521, Budapest

LOVAS ISTVÁN

Központi Fizikai Kutató Intézet, H—1525, Budapest

A metastabil mag állapotok élettartamának nagy intenzitású lézer nyaláb okozta csökkenését tárgyaljuk. Néhány konkrét esetben megbecsüljük azokat a minimális lézer intenzitás értékeket, amelyeknél a jelenség már megfigyelhető.

Kimutatjuk, hogy intenzív lézer tér jelenlétekor a tiltott $0^+ \rightarrow 0^+$ átmenetek közvetlenül, γ kibocsátással is lebomolhatnak.

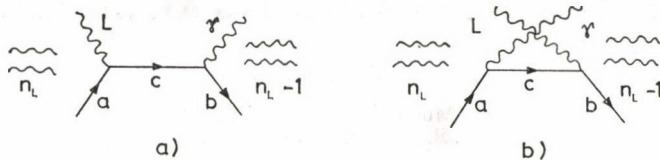
BEVEZETÉS

A nagy intenzitású lézerek rohamos fejlődésével párhuzamosan alakult ki és napjainkban egyre fokozódik az érdeklődés az ezen intenzív lézerek által indukált magfizikai folyamatok iránt. Az eddig vizsgált folyamatok alapvetően két csoportba sorolhatók. A lézer vagy közvetlenül az atommaggal, illetve annak összetevőivel hat kölcsön [1—5] vagy megváltoztatja az atomi környezetet, illetve a keletkező bomlástermék állapotát [5—7]. (A témakör részletesebb irodalomjegyzékét [5]-ben találhatjuk meg.) Itt a közvetlen kölcsönhatás egyik fajtájával, nevezetesen a gerjesztett atommagok lézer által indukált elektromágneses legerjesztődésével foglalkozunk.

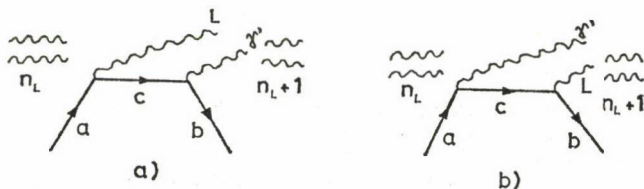
Az atommagok lézer-indukált elektromágneses átmeneteivel foglalkozott [2] és [5]. Ha a mag gerjesztett állapotából eredetileg $E3$ átmenettel bomlik, akkor intenzív lézer jelenlétekor még lehetősége van egy lézer foton elnyelése és egy $E2$ gamma foton kibocsátása útján ugyanabba a végállapotba jutni. Ezt a folyamatot vizsgálta [2] és [5]. Eltekintve a [2]-beli több, mint tíz nagyságrendnyi tévedéstől — melyet [5] részletesen tárgyal — a folyamat még igen nagy lézer intenzitások esetében ($I > 10^{18} \text{ W/cm}^2$) is alig számottevő.

Az általunk vizsgált folyamat, amely kisebb intenzitások esetén is számottevő, a következő. A gerjesztett mag a lézer terében lézer foton abszorpciójával vagy indukált emissziójával — ez utóbbit a fenti munkák nem vették figyelembe — virtuálisan egy közbenső, átmeneti állapotba jut, majd innét elektromos (vagy mágneses) *dipól* sugárzással bomlik. A lehetséges folyamatokat szemléltető gráfok az 1 A, B, illetve a 2 A, B ábrákon láthatóak.

* Érkezett 1985. június 28.



1. ábra



2. ábra

Az a , b , c állapotok az atommag kezdeti, vég, illetve közbenső állapotai, n_L a kezdeti lézer-foton szám. Az 1 A, B ábrákon ábrázolt folyamatok az abszorpciót, a 2 A, B ábrákon levők pedig az indukált emissziót adják. Amennyiben a kijövő sugárzás dipól jellegű, úgy a fenti folyamatokban csak azon a , b állapot párral rendelkező magok jöhetnek számításba, amelyeknél az a és b állapotok között eredetileg $E2$, $M2$, illetve $E0$ átmenet dominál. Különösen érdekesek azok a magok, amelyekben az átmenet $E0$, mivel itt eredetileg nincs kijövő foton, míg a lézer által indukált folyamatban van.

A Weisskopf-féle állandó hullámfüggvény közelítést alkalmazva kiszámítjuk a fenti folyamatok időegységre jutó átmeneti valószínűségeit. Eredményünk az atommag és az átmenet jellemzőitől, valamint a lézer intenzitásától függ. Szemléletes tartalmát elemezzük és összehasonlítjuk a hasonló számítások jelen folyamatokra módosított eredményeivel. Végül néhány mag esetében a kísérletek elvégzéséhez szükséges lézer intenzitás értékeket adunk meg.

A LÉZER INDUKÁLT LEGERJESZTŐDÉS IDŐEGYSÉGRE JUTÓ ÁTMENETI VALÓSZÍNŰSÉGE

A fenti folyamatok átmeneti valószínűsége az

$$|S_{if-}^A + S_{if-}^B|^2 + |S_{if+}^A + S_{if+}^B|^2 \quad (1)$$

alakba írható, ahol

$$S_{if\mp}^A = -\frac{2\pi^2 c^2 n_{\mp}^{1/2} \delta(\omega_{\gamma} - \omega_{ab} \mp \omega_L)}{iV(\omega_{\gamma} \omega_L)^{1/2}} \sum_c \frac{\langle b | J(\mathbf{k}_{\gamma} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\gamma}) | c \rangle \times \langle c | J(\mp \mathbf{k}_L \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_L) | a \rangle}{E_c - E_a \mp \hbar \omega_L} \quad (2)$$

$$S_{if\mp}^B = -\frac{2\pi^2 c^2 n_{\mp}^{1/2} \delta(\omega_{\gamma} - \omega_{ab} \mp \omega_L)}{iV(\omega_{\gamma} \omega_L)^{1/2}} \sum_c \frac{\langle b | J(\mp \mathbf{k}_L \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_L) | c \rangle \times \langle c | J(\mathbf{k}_{\gamma} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\gamma}) | a \rangle}{E_c - E_a + \hbar \omega_{\gamma}}. \quad (3)$$

Itt $|i\rangle$ a kezdeti $|f_-\rangle, |f_+\rangle$ pedig a lehetséges végállapotokat írja le, amelyek a következők: $|i\rangle = |a\rangle \otimes |n_L\rangle \otimes |0\gamma\rangle$, $|f_-\rangle = |b\rangle \otimes |n_L-1\rangle \otimes |1\gamma\rangle$, $|f_+\rangle = |b\rangle \otimes |n_L+1\rangle \otimes |1\gamma'\rangle$, $|a\rangle$ és $|b\rangle$ a mag kezdeti és végállapota, továbbá $|1\gamma\rangle, |1\gamma'\rangle, |0\gamma\rangle, |n_L\rangle, |n_L-1\rangle, |n_L+1\rangle$ foton-szám sajátállapotok. A (2) és (3) formulákban

$$\langle u | J(\mathbf{k}, \epsilon) | v \rangle = \int \langle u | \mathbf{j} | c | v \rangle \epsilon \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{x}) d^3x, \quad (4)$$

ahol $|u\rangle$ és $|v\rangle$ a szóban forgó $|a\rangle, |b\rangle$, illetve $|c\rangle$ magállapotok valamelyike, továbbá V a normálási térfogat, ϵ egyike a \mathbf{k} hullámszám vektorra merőleges két polarizációs vektornak, $-$ és $+$ a lézer-foton abszorpcióját, illetve emisszióját jelöli, $E_c \neq E_a > E_b$ a mag állapotok megfelelő energiái, \mathbf{j} az atommag áramsűrűsége, $n_- = n_L, n_+ = n_L + 1$ és $\omega_{ab} = (E_a - E_b)/\hbar$.

A legerjesztődés átmeneti valószínűségéből a szokásos módon kapható meg a w_{if} időegységre vonatkoztatott átmeneti valószínűség és ebből σ a folyamat hatáskeresztmetszete

$$\sigma = w_{if}/\Phi_L, \quad (5)$$

ahol $\Phi_L = cn_L/V$ a foton fluxus. $\sigma = \sigma^{(-)} + \sigma^{(+)}$, $\sigma^{(-)}$ és $\sigma^{(+)}$ a lézer-foton abszorpciójával, illetve indukált emisszióval lezajló γ foton kibocsátás hatáskeresztmetszete. (Az indukált emissziós folyamat az indukált emisszió fotonszámmal való arányossága miatt formálisan írható csak ilyen alakba.)

A lézerek frekvenciája a mai lézerek esetében igen messze van a mag-átmenetek frekvenciáitól, ezért a lézer számottevően csak dipól átmenetet tud indukálni. Ha még azt is figyelembe vesszük, hogy a kijövő γ foton is dipól sugárzás, akkor ez azt jelenti, hogy a (2)-ben és (3)-ban előforduló $|c\rangle$ közbenső állapot mind az $|a\rangle$ -ból, mind pedig a $|b\rangle$ -ből dipól átmenettel érhető el, azaz (2) és (3) csak a nevezőben, illetve a kijövő γ energiában különbözik. Mivel az alapállapothoz közelfekvő állapotok között a dipól csatolás gyenge, ezért feltehetjük, hogy a (2) és (3)-beli szummákhoz csak azok az állapotok adnak számottevő járulékot, amelyekre az $E_c - E_a \pm \pm \hbar\omega_L \cong E_c - E_a + \hbar\omega_\gamma \cong E_c - E_a$ közelítés igaz. A fentebbiek, valamint a $\hbar\omega_\gamma \cong \hbar\omega_\gamma$, és az $n_L \cong n_L + 1$ segítségével belátható, hogy

$$|S_{if-}^A + S_{if-}^B|^2 = |S_{if+}^A + S_{if+}^B|^2$$

$$\sigma^{(-)} = \sigma^{(+)} \quad \text{vagyis} \quad \sigma = 2\sigma^{(-)}.$$

Elég tehát $\sigma^{(-)}$ -t számolni. A fentebbiekhez hasonlóan belátható, hogy $|S_{if-}^A + S_{if-}^B|^2 = 4|S_{if-}^A|^2$, ami a

$$\sigma = 8 \sum_{\tau} \int \left| \sum_c \frac{\langle b | J(\mathbf{k}_\gamma, \epsilon_\gamma) | c \rangle \langle c | J(\mathbf{k}_L, \epsilon_L) | a \rangle}{E_c - E_a} \right|^2 \frac{\omega_\gamma}{\omega_L} d\Omega_\gamma \quad (6)$$

eredményre vezet, ahol Ω_γ, τ a gamma detektálás térszöge és a gamma foton helicitása. A (6)-ban szereplő mátrix elemeket a multipól operátorok redukált mátrix elemei szerint kifejtve [8], a multipól kifejtésben a dipól tagnál megállva, a lézer és a kijövő γ foton helicitását (ν és τ) lefixálva, a kijövő γ térszögére felintegrálva, a bejövő lézer-foton irányára kiátlagolva, a kijövő foton, valamint a közbenső és végállapot mágneses kvantumszámára felösszegezve, továbbá a $3j$ szimbólumok

és a $D_{\alpha\beta}^{\gamma}$ függvények ortogonalitási relációit kihasználva [9] a következő kifejezést kapjuk

$$\sigma^{(-)} = \sum'_{c, c', \tau} \frac{256\pi^3}{81} k_{\gamma}^3 k_L \frac{\langle c \| M(E1) \| a \rangle \langle c' \| M(E1) \| a \rangle^* \langle b \| M(E1) \| c \rangle \langle b \| M(E1) \| c' \rangle^*}{(2J_c + 1)(2J_a + 1)(E_c - E_a)(E_{c'} - E_a)}. \quad (7)$$

Itt $\langle u \| M \| v \rangle$ a redukált mátrix elem. A szumma feletti vesszővel azt jelöltük, hogy az összegezést csak a $J_c = J_a$, impulzusmomentumú állapotokra kell végrehajtani, továbbá, hogy az m_c, m_a szerinti összegezést már elvégeztük. A továbbiakban a Weisskopf-féle állandó hullámfüggvény közelítést használjuk [10] és ekkor az $\langle u \| M \| v \rangle$ redukált mátrix elem csak az u, v állapotok impulzusmomentumaitól függ. Így (7) a $B(E1; u \rightarrow v)$ redukált átmeneti valószínűség definíciójának [11] felhasználásával a következőképpen írható.

$$\sigma^{(-)} = \sum_{\tau} \frac{256\pi^3}{81} k_{\gamma}^3 k_L \left[\sum'_c \frac{B(E1; a \rightarrow c)}{E_c - E_a} \right] \left\{ \sum'_{c'} \frac{B(E1; c' \rightarrow b)}{E_{c'} - E_a} \right\}. \quad (8)$$

Az állandó hullámfüggvény közelítés miatt igaz, hogy $B_W(E1; c \rightarrow b) \cong B_W(E1; c \rightarrow a)$ (W index a Weisskopf közelítésre utal.) Így a $B(E1; c \rightarrow a) = (2J_c + 1)/(2J_a + 1) \times B(E1; a \rightarrow c)$ azonosság, valamint a mag polarizálhatóság definíciójának [12]

$$P = \frac{8}{9} \pi \sum_c \frac{B(E1; a \rightarrow c)}{E_c - E_a} \quad (9)$$

segítségével, továbbá kihasználva, hogy $\sigma = 2\sigma^{(-)}$ a

$$\sigma = 16\pi \frac{2J_c + 1}{2J_a + 1} k_{\gamma}^3 k_L P^2 \quad (10)$$

eredményt kapjuk.

A mag polarizálhatóságot $P = NZe^2/M A \omega_0^2$ alakban adhatjuk meg, ahol $\hbar\omega_0 = 41 A^{-1/3}$ MeV [13] és N, Z, A a neutron, proton és nukleon szám, e az elemi töltés és M a nukleon tömeg. Így $P = 1,46 ZNA^{-1/3}$ fm³. Ezt (10)-be behelyettesítve majd az így kapott eredményt (5)-be írva az időegységre jutó átmeneti valószínűségre a következő eredményt kapjuk:

$$w_{if}(E1 - E1) = 3.03 \cdot 10^{-21} E_{\gamma}^3 I_L \frac{Z^2 N^2}{A^{2/3}} \frac{(2J_c + 1)}{(2J_a + 1)}, \quad (11)$$

ahol I_L a lézer intenzitás W/cm²-ben, E_{γ} a kijövő γ foton energiája (azaz kb. $E_a - E_b$) MeV-ben és az eredményt w_{if} -t sec⁻¹-ben kapjuk. Hasonló eredményt kapunk egy $E1 - M1$ átmenetre (ami eredetileg $M2$), ha (11)-et megszorozzuk a $2B_W(M1)/B_W(E1)$ aránnyal

$$w_{if}(M1 - E1) = 1.84 \cdot 10^{-21} E_{\gamma}^3 I_L \frac{Z^2 N^2}{A^{4/3}} \frac{(2J_c + 1)}{(2J_a + 1)}. \quad (12)$$

Formuláink tehát már csak a magjellemzőktől és az átmenet paramétereitől függenek.

ÖSSZEFOGLALÁS

Eredményünk a következő szemléletes tartalommal bír. Az eredetileg a állapotban levő atommag a lézer hatására a lehetséges közbülső c állapotok közül lényegében csak az a állapotra ráépülő óriás rezonancián keresztüli virtuális átmenettel végez dipól bomlást. Mivel az óriás rezonancia dipól csatolása az eredeti állapottal és a végállapottal is erős a többi szóba jöhető állapotéhoz képest, ezért jó közelítés, ha csak ezen az állapoton keresztüli bomlást vizsgáljuk. Ekkor [2]-höz hasonló gondolatmenettel a hatáskeresztmetszetek

$$\sigma_{a,b}^{(\mp)} = \frac{\lambda_L^2}{2\pi} \frac{\Gamma_{ar}(\hbar\omega_L)\Gamma_{rb}(E_\gamma)}{(E_r - E_a \mp \hbar\omega_L)^2 + 1/4\Gamma_r^2}, \quad (13)$$

ahol λ_L a lézer hullámhossza, Γ_{ar} és Γ_{rb} az indexben levő állapotok közötti átmenetek parciális szélessége (de nem az átmeneteknek megfelelő $\hbar\omega_{ar}$, illetve $\hbar\omega_{rb}$ energiáknál, hanem a $\hbar\omega_L$ és az $E_\gamma = E_a - E_b$ energiáknál). E_r és Γ_r pedig az óriás rezonancia energiája és teljes szélessége. A [2]-ben alkalmazott közelítések továbbra is érvényesek maradnak és így [2] (3) képzeletéhez hasonlóan

$$\sigma_{a,b}^{(\pm)} = \frac{\lambda_L^2}{2\pi} \frac{\Gamma_{ar}(\hbar\omega_L)\Gamma_{rb}(E_\gamma)}{E_r^2}. \quad (14)$$

A Γ_{ar} és Γ_{rb} szélességeket a $B(E1)$ redukált átmeneti valószínűségeken keresztül kifejezve [11], valamint a polarizálhatóság és az óriás-rezonancia paraméterének kapcsolatát figyelembe véve [12, 13] $\sigma_{a,b}$ -re ($\sigma_{a,b} = \sigma_{a,b}^{(-)} + \sigma_{a,b}^{(+)}$) a spineket tartalmazó faktort leszámítva (10)-zel megegyező kifejezést kapunk:

$$\sigma_{a,b} = 16\pi k_\gamma^3 k_L P^2. \quad (15)$$

Az átmeneti valószínűségekre vonatkozó eredményeinket, valamint [2] és [5] eredményeinek az általunk vizsgált folyamatokra érvényes módosításait összehasonlítottuk. Eredményünk [2]-énél kétszer, [5]-énél pedig nyolcszor nagyobb. Az eltérés oka egyrészt az általunk figyelembe vett indukált emissziós folyamat (kettes faktor [2]-höz képest), másrészt az, hogy [5] szemiklasszikusan számol, azaz egy ω frekvenciás külső zavar hatását vizsgálja és így értelemszerűen nem veszi figyelembe az 1. ábrán látható két gráf hatását, hanem csak egyét. Ez hozzá képest az első okból fakadó kettes faktor mellé további négyes faktort jelent.

Kísérleti lehetőségek

Kísérleti szempontból két folyamatot tárgyalunk. Először a lézer $E0$ átmenetekre gyakorolt hatását vizsgáljuk. Bizonyos magoknál (pl. ^{72}Ge , illetve ^{90}Zr [14]) a 0^+ impulzusmomentumú alapállapot felett levő első gerjesztett állapot impulzusmomentuma is 0^+ . Ezért ezen gerjesztett állapotok csak belső konverzióval (illetve energetikailag lehetséges esetekben belső párképzéssel) bomlanak le. Intenzív lézer tér jelenlétekor a legerjesztődés közvetlen $E1$ gamma foton kibocsátásával is megtörténhet. Tehát itt a lézer nélkül nincs kilépő foton, míg a lézer bekapcsolásakor van. Bevezetjük a kritikus intenzitás fogalmát, ami az a lézer intenzitás, amelynél

a lézer indukált felezési idő egyenlő az állapot természetes felezési idejével. A kritikus intenzitásokat a természetes felezési idők ismeretében a (11) formulából határoztuk meg. ^{72}Ge ($\tau_{sp}=420$ ns) esetében $I_k=8.8 \cdot 10^{21}$ W/cm², illetve ^{90}Zr ($\tau_{sp}=61$ ns) esetében pedig $I_k=1.15 \cdot 10^{21}$ W/cm². Ezek az intenzitások napjainkban még elérhetetlenül nagyok, de a lézerek rohamos fejlődése mellett a közeljövőben nem tűnnek elképzelhetetleneknek. Amennyiben sikerül ilyen intenzitású forrásokat előállítani, akkor a lézerrel koincidenciában az $E0$ átmenetnek megfelelő energiájú γ fotonok mérhetők.

A másik fajta folyamatban a lézer a kijövő foton multipolaritását „csökkenti”. A ^{177}Hf mag $J=23/2^+$ állapota ($\tau_{sp}=1.1$ s) $E2$ átmenettel rendelkezik, amelynek energiája 0,228 MeV. Hasonlóképpen a ^{180}Hf $J=8^-$ állapota ($\tau_{sp}=5,5$ óra) 0,501 MeV energiájú $M2/E3$ kevert átmenettel rendelkezik. Ezen magoknál a kritikus intenzitás értékek rendre $I_k=1,06 \cdot 10^{16}$ W/cm² (^{177}Hf), illetve $I_k=2,96 \cdot 10^{12}$ W/cm² (^{180}Hf). Ezeknél az izomereknél kétfajta mérés képzelhető el. Egyrészt ha a rendelkezésre álló lézer intenzitás jóval meghaladja a fenti kritikus értéket és a lézer által indukált felezési idő összemérhető a lézer impulzusának hosszával, akkor a lézer besugárzás alatt az izomerek igen nagy száma elbomlik, azaz egy lézer impulzus jelentős aktivitás csökkenést eredményez. Az effektus ekkor a lézer besugárzás előtti, illetve utáni aktivitások mérésével mutatható ki. Az aktivitás nem a természetes bomlásnak megfelelően csökken, hanem intenzívebben. Másrészt a kritikus intenzitással összemérhető lézer intenzitások esetében a lézer besugárzások (impulzusok) alatt, illetve, utána azonos ideig mért eseményszámok N_1 és N_2 különbsége $N_1 - N_2$ a lézer intenzitással egyenes arányban nő.

IRODALOM

1. C. B. Collins, S. Olariu, M. Petrascu, Iovitzu Popoescu, Phys. Rev. Lett. 42, 1397—1400, 1979.; Phys. Rev. C20, 1942—1945, 1979.
2. B. Arad, S. Eliezer, Y. Paiss, Phys. Lett. A74, 395—397, 1979.
3. W. Becker, R. R. Schlicher, M. O. Scully, M. S. Zubiry and M. Goldhaber, Physics Lett. 131B, 16, 1983.
4. C. B. Collins, B. D. DePaola, Optics Lett. 10, 25, 1985.
5. R. R. Schlicher: Zerfall Radioaktive Kerne in Intensiven Strahlungsfeldern. Dissertation, München 1984.
6. W. Becker, R. R. Schlicher, M. O. Scully, Nucl. Phys. A426, 125, 1984.
7. G. C. Baldwin, S. A. Wender, Phys. Rev. Lett. 48, 1461, 1982.
8. K. Alder, R. M. Steffen, Emission and Absorption of Electromagnetic Radiation, in the Electromagnetic Interaction in Nuclear Spectroscopy ed. by W. D. Hamilton (North-Holland, 1975) 20. old.
9. A. Bohr, B. R. Mottelson, Nuclear Structure Vol. 1, 2., W. A. Benjamin New York, Amsterdam 1969, 1975. Vol. 1.
10. Lásd [9] Vol. 1. 388—389.
11. Lásd [9] Vol. 1. 381—382.
12. K. Alder, A. Winther, Electromagnetic Excitation. North-Holland 1975.; App. J. 341 old. és [9] Vol. 2. (6—287) a 459.
13. Lásd [9] Vol. 2. (6—287) a 459. oldalon és (6—313) a 481.
14. C. M. Lederer, V. S. Shirley: Table of Isotopes, Seventh edition, John Wiley & Sons 1978.

KÖNYVISMERTETÉS

**P. Hammerling, A. B. Budgor and A. Pinto (eds): Tunable Solid State Lasers
Springer Series in Optical Sciences 47. kötet**

Kívülállók számára talán kétszeresen is meglepő a cím. A lézerek monokromatikussága, egy-egy lézer típus meghatározott emissziós hullámhossza, hosszú éveken keresztül a stabilitás a megváltoztathatatlanlanság képzetét sújkolta a fejekbe.

Később néhány lézer több hullámhosszon is működni kezdett, majd a festéklézerek elterjedésével a szélesebb tartományon történő folytonos hangolhatóság is köznapivá vált. A lézerfizika ma már a látható körüli tartományon széles skálán ki tud elégíteni minden reális felhasználói hullámhossz igényt.

Ennek ellenére nem eléggé közismert, hogy nemcsak festék, de szilárdtest lézereket is lehet hangolható változatban készíteni. Még erősen él a piros rubin és az infravörös neodímium-üveg vagy YAG lézerek kizárólagos képe.

Az elmúlt évek a szilárdtest lézerek területén is jelentős változásokat hoztak. Gyakorlati felhasználás és technikai megvalósítás szempontjából ugyanis — viszonylag nagy áruk ellenére is — számtalan előnyös tulajdonsággal rendelkeznek. Triviális igénynek látszott, hogy a lézer hullámhosszát ne csak a lézerezőanyag cseréjével, hanem egy bizonyos tartományon folytonosan, egy lézerezőanyag használatakor is változtatni lehessen.

A szilárdtest hordozókba ágyazott szennyező anyagok vibrációs átmenetei kecsegtettek reménnyel, s nem alaptalanul. Igaz az első eredmények csak az infravörös tartományon jelentkeztek, de ma pl. alexandrit kristályokkal már látható tartományt is sikerült elérni.

A hangolható szilárdtest lézerezőanyagok „kitalálói” elméleti szilárdtest és lézerfizika), készítői és felhasználói első konferenciájukat tartották (két korábbi workshop után) 1984 júniusában La Jolla-ban, Californiában. A 20 meghívott előadó és 17 poszter anyagából választották ki (csak ezek küldték be az anyagot nyomdakészen, vagy csak ezek publikálását engedélyezték?) 22-t, ami a kötetben megjelent.

Bizonyos áttekintést nyújtanak a cikkek az anyagok kutatása, gyártása, tesztelése és felhasználása témaköréből, de leglényegesebbnek az a másfél oldal tűnik, mely a szakma „nagyjainak” jövőbeli elképzeléseiről tartott kerekasztal-beszélgetés összefoglalóját tartalmazza.

Kiemelésre érdemes a NASA átgondolt és profi módon megfogalmazott követelményrendszere. Mint fő felhasználó, főleg a LIDAR mérések tekintetében, más szakmák számára is mintaként tekinthető példáját adja annak, hogy hogyan lehet egy kutatási területnek világos, célra orientált, ugyanakkor távlatilag is érdekes feladatkört körülhatárolni.

Az előadások egyébként eléggé visszafogottak. Egyes területeken — főleg azok katonai vonatkozása miatt — inkább csak felületesen vázolt rendszertervekkel találkozhatunk. Másokon a megélhetést biztosító „know-how” megőrzésére, ugyanakkor a publikációk számának gyarapítására irányuló igény látszik egyszerre, értelemszerűen felemás sikerrel.

A kérdéskörrel üzleti siker reményében csak nagy országok világhírű cégei tudnak foglalkozni. A kötet nem reklám, vagy gyártmányismertető színvonalon íródott, de ha az is lenne, a „sikeresebb lézerezőanyagok” számunkra több okból is hozzáférhetetlenek, így a könyv hazánkban csak igen mérsékelt érdeklődésre számíthat.

Horváth Zoltán György

Zeldovich, Pilipetsky, Shkunov: Principles of Phase Conjugation
Springer Series in Optical Sciences, 42.

A Szovjetunióban a koherens és nemlineáris optikát igen magas szinten művelik. Ezen iskola három neves képviselője a könyv három szerzője, akik az optikai fáziskonjugálás fizikai alapjaival ismertetik meg az olvasót, elsősorban a szovjet fizikusok — nagy részben a szerzők — kutatási eredményei alapján.

Az optikai fáziskonjugálás ismertetése után a szerzők a két legfontosabb fáziskonjugálási módszert írják le, mégpedig az indukált fényvisszaszórás és a négyhullám keverés módszerét. Mindkét esetben kiegészítő fejezetek segítik az olvasót a problémák megértésében. Míg az első esetben az indukált sugárzás és a spekle jelenségét, a második módszerhez kiegészítésként a négyhullám keverés elvét ismerhetjük meg.

Az utolsó fejezet az optikai fáziskonjugálás egyéb módszereinek rövid tárgyalását tartalmazza.

Annak ellenére, hogy a fáziskonjugált fényhullámok alkalmazásai rohamosan terjednek, ezen útnak még csak a kezdetén tartunk. Ezért a szerzők úgy gondolták, hogy a tudományos és gyakorlati alkalmazásokat csak érintőlegesen említik meg és a rendelkezésükre álló terjedelemben a jelenség elméleti és kísérleti alapjait tárgyalják részletesen, mivel ezek már jól ismertek.

A könyv tárgyalásmódja bevezetés jellegű, ezért ajánlható minden, az optika alapjait ismerő olvasónak, de érdemes kézbe venni a kvantumoptika területén tevékenykedő kutatóknak is ha a fáziskonjugált hullámok témakörében kívánnak elmélyedni.

Króó Norbert

D. Berényi and G. Hock (eds): High-Energy Ion-Atom Collisions
Proceedings of the 2nd Workshop on High-Energy Ion-Atom Collision Processes, Debrecen, Hungary,
August 27—28, 1984. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1985.

A debreceni ATOMKI 1981 után másodszor rendezett találkozót nagyenergiájú ion-atom ütközésekről 1984-ben, a konferencia tematikáját azonban ezúttal a MeV/nukleon tartományra korlátozták.

Ez a konferencia is jól példázza azt, hogyan kap új erőre egy viszonylag régi tudományterület más kutatási irányokkal való kölcsönhatás révén. Az atomhøj fizikája szolgált a kvantumelmélet alapjául a századunk elején. Napjainkban, a magfizikai módszerek meghonosítása következtében az atomhøj dinamikai vizsgálata népszerű, új kutatási területe lett a magfizikusoknak — ezért is szervezi ezeket a találkozókat az ATOMKI.

A konferencia-kiadványoknál szokásos módon a szerkesztők az előadásokat téma szerint csoportosították. Az első rész a könnyű ionok előidézte Coulomb-ionizációval foglalkozik, az ionizáció hatáskeresztmetszetének elméleti és kísérleti meghatározásával, relativisztikus és héjefektusokkal. A belsőhéj-ionizáció nyomán keletkezett vakanciák a következő két fejezet témája; rendeződési hatások és elektron-korrelációk. A nehéz ionok többszörös ionizációt okoznak, a negyedik rész előadásai a többszörös ionizációt kísérő jelenségeket, illetve azok vizsgálati módszereit és lehetséges alkalmazásait foglalják össze. A belső héjak legerjesztődési folyamatait tárgyalja az ezután következő három rész: röntgenfluoreszcenciát, elektronbefogást és elektronemissziót. Végül az utolsó rész ion-szilárdtest kölcsönhatásokkal foglalkozik.

A kötet Berényi Dénes akadémikus megnyitó beszédével kezdődik, B. Crasemann (Univ. Oregon, USA) zárszavával végződik és függelékül tartalmazza a konferencia programját, valamint a résztvevők és a szerzők névmutatóját.

Horváth Dezső

A. F. Alexandrov, L. S. Bogdankevich, A. A. Rukhadze:
Principles of Plasma Electrodynamics
Springer Series in Electrophysics 9.
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1984.

A kötet a szerzők „Osznovü elektroginyamiki plazmü” című könyvének angol nyelvű, bővített, átdolgozott kiadása. A könyv a függeléken kívül 12 fejezetre oszlik.

Az első fejezet a termodinamikai egyensúlyban levő, stabilis plazma lineáris elektrodinamikájával foglalkozik: alapegyenletek, peremfeltételek. Ezt követi a különböző plazmamodellek, köztük

a legfontosabb: a self-consistent-fielde alapozott kinetikai egyenlet részletes ismertetése. A plazma komplex elektromos vezetőképességének és dielektromos permittivitásának, a plazmában terjedő, lineáris, elektromágneses hullámok tulajdonságainak a leírása, illetve számos, gondosan összeállított, tanulságos feladat zárja az első fejezetet.

A második fejezet az első fejezet szerves folytatása. Témája: a plazmában terjedő hullámokra vonatkozó térbeli és időbeli diszperziós összefüggések, a plazma elektromos vezetőképességének és permittivitásának részletes analízise.

A harmadik fejezetben a plazma leírására használt legfontosabb kinetikai egyenleteket ismeretik a szerzők. A többi között a Vlasov-egyenlet, a Boltzmann—Landau-egyenlet, a BBGKY-hierarchikus egyenletrendszer a tárgya ennek a fejezetnek.

A következő fejezetben a Maxwell- és a Fermi-eloszlás alapján leszármaztatott permittivitási tenzor tulajdonságaival ismerkedhet meg az olvasó.

Az ötödik fejezet tárgya a homogén, külső mágneses térben levő, egyensúlyi plazma elektromágneses oszcillációinak részletes ismertetése. Kiindulásul a Maxwell-féle, illetve elfajult plazma esetén a Fermi-féle eloszlás szolgál.

A könyv további fejezeteiben a nem egyensúlyi plazma elektromágneses tulajdonságaival foglalkoznak a szerzők. Minthogy a plazma gyakorlatilag soha sincs (makroszkopikus) egyensúlyi állapotban, a plazmabeli instabilitások szerepe mind elméleti, mind gyakorlati szempontból rendkívül fontos. Érthető tehát, hogy a szerzők részletesen ismertetik a különböző plazma-instabilitásokat, a végtelen kiterjedésű, inhomogén plazma és a véges térrészbe zárt plazma elektromágneses tulajdonságait, a nem-lineáris hullám—hullám kölcsönhatást. A szerzők — szerényen — megjegyzik, hogy „mivel a plazma nem-lineáris elektrodinamikája napjainkban rohamos fejlődésben van, a könyv nem-lineáris effektusokkal foglalkozó, utolsó (10.—12.) fejezetei hamarosan átdolgozásra szorulhatnak”. A rendkívül precíz, rendkívül gondos tárgyalásmód ismeretében a recenzens úgy véli, hogy a túlságosan óvatos és szerény „átdolgozás” szó helyett a „bővítés” szó „megfelelőbb”.

A szerzők tárgyalásmódja mind fizikai, mind matematikai szempontból rendkívül alapos, gondos, világos, logikus. Minden fejezet végén nagy számú tanulságos feladat található. Emeli a könyv értékét a részletes irodalomjegyzék és a gondosan összeállított tárgymutató.

Az utóbbi években a plazmafizikai tárgyú könyvek száma — örvendeten, — rohamosan növekszik. Köztük A. F. Alexandrov, L. S. Bogdankevich, A. A. Rukhadze könyve mind szakmai, mind módszertani szempontból egyike a legjobbaknak. A szerzők könyvüket fizikus hallgatóknak és fiatal kutatóknak szánták; ismét csak szerényen megjegyzik, hogy „haszonnal forgathatják a plazmafizikában jártasabb fizikusok is”. A recenzens véleménye szerint a könyv nem hiányozhat egyetlen fizikus házi könyvtárából sem.

Szabó János

J. Bourgoïn, M. Lannoo: Point Defects in Semiconductors II. Experimental Aspects
Springer Series in Solid State Sciences, Vol. 35.
Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1983.

A jelen kötet folytatása a korábban megjelent első kötetnek: M. Lannoo, J. Bourgoïn, Point Defects in Semiconductors I., Theoretical Aspects, Springer Series in Solid State Sciences, Vol. 22 (1981). Míg az első kötet a félvezetők és ponthibák általános elméleti leírását adta, beleértve a sekély és mély nívók részletes elméleteit, a lokális rezgési módusokat, a ponthibák termodinami káját és vándorlási mechanizmusait, a második kötet a kísérletileg észlelhető fizikai jelenségek ponthibák okozta változásait vizsgálja. A tárgyalás intrinszc rácshibákra és szennyezőkre egyaránt kiterjed, de a szerzők legrészletesebben a hiányhely példáját dolgozzák ki a különböző jelenségcsoportok illusztrációjaképpen. A könyv második kötetének sem volt célja a technikai részletkérdések taglálása.

A témakör aktualitását a félvezető technika napjainkban is töretlen, széles frontú fejlődése indokolja. Az egyik fő irány a miniatürizáció, a szubmikronos VLSI áramkörök pedig már rendkívül érzékenyek a rácshibákra. Másrészt új eszközök és technológiák jelentek meg, amelyek szintén szorosabb követelményeket szabnak a hibastruktúra részletes kézbentartására. A könyv, és különösen a jelen második kötet ezeket az igényeket is szem előtt tartva letisztult tárgyalását adja az adott tudományterületnek és számos modern kísérleti módszer alapjainak problémacentrikus ismertetésével kiindulást nyújt a téma aktív műveléséhez.

A bevezetést követő második fejezet a rácstorzulással és a Jahn—Teller effektus elméletével foglalkozik, előkészítve a többi fejezetet, így akár az első kötetbe is foglalhatták volna a szerzők.

A harmadik fejezet az elektronspin-rezonanciát, a negyedik az optikai, az ötödik az elektromos tulajdonságokat vizsgálja. A hatodik fejezet témája a töltéshordozók emissziója, rekombinációja, illetve a sugárzásmentes átmenetek. Itt található többek között a tranziens mélynívó spektroszkópia (DLTS) az admittancia spektroszkópia, továbbá a külső elektromos térrel létrehozható Frenkel—Poole és alagút effektus tárgyalása. A hetedik fejezet az összetett módszerek lehetőségeit diszkutálja. Ide sorolt módszerek a vezetőképesség, ESR, DLTS és optikai abszorpció mérése fényvel való gerjesztés közben, az optikailag detektált ESR, valamint fonon detektálás kalorimetriás és fotoakusztikus módszerrel. Ide tartozna a Josephson effektussal történő fonon detektálás is, melyet a szerzők nem emlitenek.

A két utolsó fejezet a kristályhibák részecske sugárzásokkal való előállítását, mint az egyetlen jól irányítható növesztés utáni hibakeltő módszert, illetve a hibák eltűnésének és termalizációjának részfolyamatait tárgyalja. Ezekkel kapcsolatban kitér a hibák eloszlásának kérdéseire és az amorf rétegek előállításának feltételeire, de nem tárgyalja az 1 atom %-nál nagyobb hibakoncentrációk esetét, sem a kb. tíznél több rácshelyre kiterjedő kristályhibákat.

A könyv világos és gazdaságos stílusa, részletes irodalomjegyzéke és alapos tárgyszókatalógusa miatt is hasznos segédeszköze lehet a témakörre specializálódó egyetemi hallgatóknak és szakembereknek.

Corradi Gábor

**Ole G. Mouritsen: Computer Studies of Phase Transitions and Critical Phenomena
Springer-Verlag, Berlin, 1984.**

Először a fázisátalakulások és kritikus jelenségek módszereinek leírását adja. A feladat lényegében egy soktest probléma matematikai megfogalmazása, valamint a számítógép szerepének bemutatása. Inkább az általános elvekkel foglalkozik, mint a technikai részletekkel.

A második rész példákból áll. Célja kevés, de jellemző példa lehetőleg minél többféle területről, és a példák elég részletesen szerepeljenek ahhoz, hogy az olvasó eldönthesse a lehetőségeit és hasznosságát a számítógépre alapozott vizsgálatoknak.

Erről a területről jelent már meg összefoglaló cikk (1976) és könyv (Monte Carlo Methods in Statistical Physics I and II, 1979 and 1984) Binder szerkesztésében. Jelen munka kiegészíti ezeket. A problémákat a mai olvasó érdeklődésének megfelelően igyekszik válogatni.

Felmerülhet a kérdés, hogy a fizika e fejezetét miért nevezzük el egy számításokat végző eszközről. A válasz: azért, mert a számítógép használata alapvető. A könyvben tárgyalt problémákat reálisan semmilyen más módon nem lehetne megoldani (csillagászati méretű munkaidő és munkaerő kellene egyéb módszerekhez). Ennek ellenére a könyv olvasója meggyőződhet róla, hogy nem kell számítógép szakembernek lenni, sőt nem is kell túl sokat tudni a számítógépről ahhoz, hogy e módszerekkel érdekes, nem nyilvánvaló eredményeket kapjunk.

A választott példák elsősorban a szerző saját eredményeiből valók. Ezeket három fő típusba sorolhatjuk:

- (i) tisztán elméleti statisztikus mechanikai modellekben numerikus adatok számítása (pl. többszörös integrálok, függvények),
- (ii) Bizonyos feltevések, illetve előrejelzések helyességének ellenőrzése,
- (iii) adott modellek alapján kísérleti számadatok nyerése.

A felsorolásból látszik, hogy a könyvből megismerhetjük a számítógép használatának két fő típusát. Az egyik esetben — ez talán a közismertebb — adott egyenletek alapján numerikus módszerekkel kiszámítunk számunkra érdekes számadatokat, adatsorokat.

A másik esetben adott kölcsönhatások alapján a géppel utánózzuk a fizikai rendszer mozgását, s így a kapott számadatok olyanok, mintha kísérleti eredmények lennének. A valódi kísérleti adatokkal szemben azonban van egy nagy előnyük: jól meghatározott körülmények között minden hatás kézbeartása mellett születnek. Az így kapott „kísérleti” adatokat összevetve a valódiakkal, ellenőrizhetjük a kölcsönhatásra vonatkozó feltevéseink helyességét.

Néhány a vizsgált témákból: elektromos és mágneses rendszerek abszorbeált molekula egyrétegek, ötvözetek, lipid kettősrétegek, biológiai membránok, mágneses struktúrák és szimmetriák, általános termodinamikai tulajdonságok, fázisátalakulások, kritikus viselkedés, növekedés kinetika, lipid kettősréteg olvadás, lipid—fehérje kölcsönhatás biológiai membránokban. Különös figyelmet érdemelnek a biológiai membránok, amelyek számítógépes vizsgálatáról mind ez ideig még nem jelent meg áttekintő munka.

Mecseki Attila

**Wolfgang Pauli: Wissenschaftlicher Briefwechsel mit Bohr, Einstein, Heisenberg
u.a., Bd. II: 1930—1939.**

Herausgegeben von Karl von Meyenn unter Mitwirkung von Armin Hermann
und Victor F. Weisskopf

Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York—Tokyo, 1985.

Pauli tudományos levelezésének második kötete, amely K. von Meyenne, A. Hermann és V. F. Weisskopf imponálóan nagy méretű és alaposságú vállalkozásának várva várt folytatása, az első kötet 1979-ben jelent meg. Az első és a második kötet a Springer Kiadó új sorozatának, a „Sources in the History of Mathematics and Physical Sciences” rendre a második, illetve a hatodik kötete. Ez a második kötet az 1930 és 1939 között keletkezett, Pauli által, vagy Paulihoz írott újabb 345 levelet dolgozza fel, a szokás szerint a dán nyelvű leveleket német fordításban is közli.

Ez a 10 év az alábbi periodizációt kínálja, részben a fizika fejlődésének Pauli részvételével lezajló mozzanatait, részben nemzetközi politikai események kapcsán:

- 1930 — a neutrínó-hipotézis,
- 1931 — az első magfizikai kongresszus Rómában, Pauli első amerikai útja,
- 1932 — a neutron, a deuteron, a pozitron felfedezésének beillesztése a magfizikába; Heisenberg és Ivanyenko magmodellje,
- 1933 — A Dirac-féle lyukelmélet; Pauli kvantummechanikai cikke a Handbuch der Physik-ben; — fasiszta hatalomátvétel Németországban,
- 1934 — Dirac lyukelméletének kvantumelektrodinamikai megalapozása; Joilot és a pozitron-emissziós mesterséges radioaktivitási folyamat felismerése; Fermi bétabomlás-elmélete,
- 1935 — Pauli második amerikai útja,
- 1936 — a magerők töltésfüggetlenségének felismerése; — J. Stark provokáló cikke a Völkische Beobachterben: „A német fizika és a zsidó fizika” címmel,
- 1937 — a kozmikus sugárzás kaszkád-elmélete és robbanáselmélete,
- 1938 — Yukawa magerőmodellje: yukonok; Kemmer-elmélet, Proca-egyenlet; — „Reichskristallnacht”,
- 1939 — a mezonterek egzakt relativisztikus elméletének kidolgozása; a mezonok szóródása protonokon.

A közölt dokumentumok hozzáértő elemzései, melyek túlnyomó részt V. F. Weisskopf, az egykori Pauli-munkatárs (1933—1936) szemtanú és kortárs elhivatott munkáját dicsérik, nemcsak az intenzív tudományos műhely titkaiba engednek nem mindennapi bepillantást, hanem Európa életének egyre válságosabb hétköznapijaiba is.

A kötetet rendkívül gazdag információtartalmáért és azt sokrétű összefüggésbe hozó referencia-hálózataért minden bizonnyal nagyra értékeli majd az Olvasó, aki a kvantummechanika, a kvantumelektrodinamika, a magfizika küzdelmes kezdeteire kíváncsi, de az is, aki a harmincas évek európai politika történetéhez további forrásokat keres. Hogy Pauli levelezésének ez a kötete hasznos forrás a vizsgált időszak magyar vonatkozásait illetően is, annak illusztrálására megemlítjük, hogy Barnóthy Jenő, Eötvös Loránd, Erdős Pál, Forró Magdolna, Kármán Tódor, Kudar János, Lánosz Kornél, Neumann János, Ortway Rudolf, Polányi Mihály, Pólya György, Szilárd Leó és Tisza László nevével és nemzetközi tudományos kapcsolatainak dokumentumaival találkozunk az Olvasó a kötetben.

Abonyi Iván

**Norbert Straumann: General Relativity and Relativistic Astrophysics
Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, Tokio, 1984.**

A könyv szerzője 1979-ben a Zürichi Egyetemen előadássorozatot tartott, melynek szövege 1981-ben német nyelven a „Springer Lecture Notes in Physics” sorozat 150. köteteként jelent meg. Ennek angol nyelvű kibővített és részben átdolgozott kiadása a most megjelent könyv.

A monográfia három nagy részből áll. Az első fejezet a relativitás elmélet megértéséhez szükséges differenciálgeometriai ismereteket foglalja össze, a második fejezet az általános relativitás elméletet tárgyalja, míg a harmadik fejezetben a relativisztikus asztrofizika fontosabb jelenségeit találhatjuk meg. A könyv ilyen felépítése nagyon szerencsés, mert az eddigi relativisztikus asztrofizikai könyvek olvasásakor mindig a fizikai és matematikai alapokat más forrásokból kellett elsajátítani az olvasónak, míg Straumann könyvében az összes alapismeret megtalálható.

A könyv kétségtelenül legérdekesebb fejezete a harmadik, amely a relativisztikus asztrofizika legújabb eredményeit is tartalmazza. Szó esik benne a neutron csillagok fizikájáról, a forgó fekete, lyukakról, a kettős röntgenforrásokról és a fekete lyukakba és neutron csillagokba hulló anyag fizikájáról. Különös érdeklődésre tarthat számot a neutron csillagok kihűlésével foglalkozó rész és a Kerr—Newman-féle megoldás részletes tárgyalása.

A szövegben gyakran szerepelnek gyakorló feladatok, amelyek segítségével az olvasó aktív módon sajátíthatja el az ismereteket, illetve maga vezetheti le az egyes formulákat.

A könyvet elsősorban azoknak a fizikusoknak és csillagászoknak ajánlhatjuk, akik meg akarják ismerni a relativisztikus asztrofizika eredményeit és kutatási módszereit, de azoknak a fizikusoknak is hasznos olvasmány lehet, akik az általános relativitáselmélet egy modern tárgyalási módja iránt érdeklődnek.

Dr. Marik Miklós

S. W. Lovesey, U. Balucani, F. Borsa and V. Tognetti (eds): *Magnetic Excitations and Fluctuations*
 Springer Series in Solid-State Sciences 54
 Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo, 1984.

A kötet a San Miniato-ban (Olaszország) 1984-ben tartott ötnapos nemzetközi workshopon elhangzott 40 előadás szövegét tartalmazza. A rendezvény célja az volt, hogy a mágneses rendszerek statisztikus mechanikájának jelenleg legérdekesebbnek tartott területein szembesítse az elmélet eredményeit a kísérleti tényekkel. Nem véletlen, hogy az előadások többsége az alacsony (főleg egy-dimenziós) mágnesekkel foglalkozott. A munkákat hat témacsoportba sorolták:

Az első rész a kvázi-egydimenziós mágnesek nemlineáris gerjesztéseinek kísérleti vizsgálatával foglalkozik. Itt olyan rendszerekről van szó, melyek akár mikroszkopikus okokból (CsCoCl_2 stb.), akár külső tér alkalmazásának köszönhetően (pl. a TMMC-nél) Ising-típusú anizotrópiát mutatnak, és így mind ferro-, mind antiferromágneses csatolás esetén kétféle domén képzelhető el bennük. A háromdimenziós rendeződés hőmérséklete felett a kétfajta domén közötti fal szabadon mozgó szoliton; egy olyan gerjesztés, mely a lineáris spinhullámelmélet nyelvére nem írható le, és amely bizonyos hőmérséklet- és térértékeknél dominálhatja a termodinamikai viselkedést. A nyolc közleményben (Borsa, Bourcher, de Jonge, Koppinga stb.) leírt mérési módszerek (fajhő, Mössbauer, NMR, neutronszerzés) nemcsak a szolitonok sűrűségéről, de azok szerkezetéről (keskeny vagy vastag doménfal) és sebességéről is információt adnak.

Az egydimenziós spinhullámok dinamikáját tárgyaló második részből különösen érdekes pl. Bonner és Parkinson munkája, amiben azt a mindmáig eldöntetlen kérdést tárgyalják, hogy van-e a kvantum-spinláncok alapállapotú fázisdiagramjának lényegi S -függése, tehát létezik-e az ún. Heisenberg-fázis páros S esetén. Gerling és Landau az 1- és 2-dimenziós klasszikus XY-modell nemlineáris gerjesztéseit tanulmányozzák Monte Carlo módszerrel. Meech és Lovesey a dinamikus struktúrafaktort kísérlik meg kiszámítani a tér-indukált spin-flop átmenet környékén. Pini és Rettori szerint a CsNiF_2 — a TMMC-vel ellentétben — nem írható le klasszikus szoliton-hordozó rendszerként, hanem itt a kvantumviselkedés dominál.

A szoliton elméletben (ez a könyv harmadik része) a legtöbb pozitív eredmény a termodinamikai viselkedésről ismert, ami a klasszikus, kontinuum sine-Gordon modellben háromfajta szoliton-gerjesztés és fononok ideális gázaként való leírást sugall. A nehézség éppen a gyakran nem-integrálható (esetleg kaotikus) rácsmódelből és integrálható kontinuum-módelbe való átmenetnél jelentkezik (Timonen, Capel, Fogedby). — Fowler arra hívja fel a figyelmet, hogy még az iskolapéldaként használt TMMC esetében is, 50% eltérés is lehet a kvantum sine-Gordon modell jóslata és a kísérleti eredmények között.

Az igen tarka negyedik rész a „Kevert és rendezetlen mágnesek” címet viseli. Kiragadott témák: Allia és Vinai új lokális rendparamétert vezetnek be a fémüvegek szerkezetének jellemzésére, a mágneses permeabilitás relaxációjának tárgyalásában. Cieplak és Banavar frusztrált spinüvegmodelleket definiálnak fraktális rácson. — Rendkívül érdekes cikkében Villain azt fejtegeti, hogy bár a véletlenszerűen változó külső térbe helyezett Ising-modell kettőnél nagyobb dimenzióban egyensúlyi rendeződést kell, hogy mutasson, ez nem feltétlenül az, amit kísérletileg látni tudunk. Ennek oka az, hogy a véletlen térben hűtött minta a paramágneses fázisból egy metastabil állapotba megy át, melyet egy bonyolult doménszerkezet befagyása jellemez. Ez összhangban lenne bizonyos neutronszerzési mérésekkel. Ehhez kapcsolódnak egy illusztrációs szerződötös (Cowley, Hagen, Yoshizawa, Shirane, Birgeneau) hasonló mérései $\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ — n, ahol azt használják ki, hogy egy rendezetlen antiferromágnes számára a homogén külső tér látszik véletlennek.

Érdekes, hogy még ebben a csaknem izotróp mágnesben is látható a nem-egyensúlyi állapotba való átmenet, ha a hűtés közepesen erős terekben történik. — Hone és Rezendé arról kíváncsiak meggyőzni az olvasót, hogy sok érdekesség lehet még egy olyan klasszikus témában is, mint a lokalizált magnonok spindinamikája; ezt a $\text{FeF} : \text{Mn-on}$ végzett igen alapos távoli infravörös mérésekkel támasztják alá.

A rendezett mágnesek gerjesztési spektrumával foglalkozó ötödik részben a mágneses félvezetők elektrongerjesztéseiről, felületi magnonokról, a Heisenberg-modell egy új korrelációs tárgyalásáról (Lindgard) és a mágneses gerjesztések skálaelméleti leírásáról (Southern) találunk dolgozatokat.

Az „Új mágneses modellekről és rendszerekről” szóló hatodik rész is rendkívül heterogén. Érdekes Gschneider cikke arról, hogy a spinfluktuációk erős mágneses térrel való elnyomását fahőmérséklet tanulmányozva, hatféle különböző viselkedésmódot találunk. Itt elsősorban kevert valenciájú és Kondo-rács anyagokról van szó, akárcsak Huber munkájában, mely a hibridizációs-tiltott sáv mibenlétéről folytatott Mott — kontra — Anderson vitához szól hozzá. Rokon témájú még Thalmeier műve, melyben arról esik szó, hogy a CeAl_2 -ben a kristálytér-gerjesztések és a fononok között állapotot képezhetnek. Richards ritka-földfém ionokon végzett műonspektroszkópia mérésekről számol be.

Mínthogy a 40 cikk csak 220 oldalt tesz ki, ezek szükségképpen tömörek, és az olvasónak az eredeti közelményekhez kell fordulnia, ha a témák valamelyikéről többet akar megtudni. A könyv hasznossága éppen abban rejlik, hogy nagyszámú probléma mibenlétére ad olyan utasítást, ami a tájékozódásra, illetve az érdeklődés felkeltésére alkalmas. Haszonnal forgathatják a mágnesség szakértőin kívül mindazok a szilárdtestfizikusok, akik a rendezetlen vagy erősen korrelált rendszerek iránt érdeklődnek.

Fazekas Patrik

**Szabó S. András: Radioökológia és környezetvédelem
Mezőgazdasági Kiadó, Budapest, 1985.**

Szabó S. András könyve a *Biológiai környezetünk védelme* sorozat 17. köteteként jelent meg, s az ökológia tudományágának egyik speciális területével, a radioaktív anyagok migrációjával, transzportjával, koncentráció változásával s az ezeket befolyásoló tényezőkkel foglalkozik. Érdeme a szerzőnek, hogy a bioszféra egyes elemei közötti komplex kölcsönhatásokat is bemutatja, egységbe foglalva a levegő—víz—talaj—növény—állat—ember ökológiai rendszert.

A 237 oldalas könyv 4 fejezetből áll. Az első fejezet témája a bioszféra radioaktivitásának kialakulása. A könyv fő részét a második fejezet képezi, itt a szerző részletesen elemzi a bioszféra elemeinek radioaktivitását — természetes eredetű aktivitás és radioaktív kontamináció —, valamint azokat a különböző (pl. éghajlati, meteorológiai, agrokémiai) tényezőket, amelyek befolyással vannak a radioaktivitásra. A második fejezet egyik alfejezete foglalkozik az emberi szervezetet érő sugárterhelés kérdésével.

A harmadik fejezet megismerteti a Magyarországon folyó radioökológiai kutatásokkal, az ezeket folytató intézményekkel, a negyedik befejező rész izgalmas címe: „Mit hoz a jövő?”. Itt esik szó az atomerőművek, a nukleáris technika szennyező hatásáról. Szabó S. András könyve hosszú évek kutatómunkájának eredményeire épül, s elsősorban a sugárvédelem, dozimetria, radiobiológia ökológia, környezetvédelmi kérdések iránt is érdeklődő szakembereinek szól. Úgy gondolom, hogy a „Radioökológia és környezetvédelem” a rohamosan fejlődő radioökológiai tudomány lényeges kérdéseit korszerűen tárgyaló, a szakirodalmat kellő alapossgággal feldolgozó, igényesen megírt mű. Meggyőződésem, hogy joggal kelti fel az érdeklődést, hiszen ez az első magyar nyelvű, a radioökológia kérdéseit átfogóan tárgyaló szakkönyv.

Dr. László Péter

**F. Herlack: Strong and Ultrastrong Magnetic Fields and Their Applications
Springer, Berlin—Heidelberg—New York—Tokyo, 1985.**

A Springer Kiadó Alkalmazott Fizika sorozatában jelent meg a nagy mágneses terek előállításával és felhasználásával foglalkozó kötet.

A Bevezetésben Herlack felvázolja a nagy mágneses tereket keltő berendezések fejlődését Ampère ős-szolenoidjától a vassal elérhető 5 T (50 kg) térerősség átlépésén, a 15—20 T teret adó Bitter mágneseken (amelyek 5—10 MW energiát használnak fel) át a modern polihélix, szupravezető

és hibrid mágnesekig. Bemutatja a világ legjelentősebb mágnes laboratóriumait, azok technikai lehetőségeit (Francis Bitter National Magnet Laboratory, Grenoble, Wrocław, Nijmegen, Braunschweig, Sendai, Oxford, Ibarakiken) és az impulzusterekkel foglalkozó legfontosabb kutatóhelyeket.

A további fejezetek főleg az alkalmazásokkal foglalkoznak, ezek többsége a szilárdtestfizikával kapcsolatos. Hajdú J. és G. Landwehr ad összefoglalót a kvantumtranszport jelenségekről félvezetőkben. Egy vezetési elektron szempontjából „erős” az a tér, ahol a ciklotron sugár kisebb a szabad úthossznál. Fémeknél alacsony hőmérsékleten ez az állapot könnyen elérhető, míg félvezetőkben csak a nagy erősségű mágneses terek megjelenése tette lehetővé a kvantumtranszport jelenségek megfigyelését, így pl. kétdimenziós szerkezetekben a magnetotranszport effektusok mérését.

Az erős mágneses terek nélkülözhetetlenek a mágneses anyagok kutatásában, mert az alapvető (pl. kicserélődési) kölcsönhatásokkal egyező nagyságrendűek. A nagyterű mágnességgel foglalkozik Motokawa, Roeland és Schinkel. Röviden tárgyalják a mágneszettségmérés technikáját erős mágneses terekben; a kristálytér effektusokat, spinhullámokkal kapcsolatos jelenségeket, az itinerens ferromágnesség problémáit, a kicserélődési és relaxációs folyamatokat, optikai és rezonanciaeffektusokat, amelyeket erős mágneses tereken (160 T térerőig) végzett mérésekkel mutattak ki.

Az utóbbi években nagy léptekkel haladt előre a nagy biomolekulák *in vivo* kutatása erős mágneses terekben. A 4. fejezetben Maret és Dransfeld adja ezeknek a kutatásoknak első összefoglaló leírását, ismertetve a polimerek, polimerizációs reakciók, folyadékkristályok, biológiai membránok és mesterséges multirétegek kutatását; makromolekulák szétválasztását nagy mágneses térgradiensben és a mágneses tér hatását élő sejtekre és szervezetekre. Ki kell emelni a nagy terek jelentőségét a biológiai anyagok nagyfelbontású mag-mágnesesrezonancia spektroszkópiájában. A szerzők nem foglalkoznak a váltakozó és mikrohullámú terek hatásával.

Jelenleg a legnagyobb elektromágneseket a plazmafizika és fúziós kutatások igénylik. Itt nem is a rekord térerőn, hanem a rendkívüli méreteken és geometrián van a hangsúly. Montgomery az Alcator tokamak és más, nyitott lineáris rendszerek alapján ismerteti az 5. fejezetben a szükséges teljesítmény, hűtés, a fellépő mechanikai feszültségek okozta problémákat és konstrukciós kompromisszumokat.

A 6. fejezetben Miura és Herlach a rendkívüli erősségű impulzus mágneses terekkel foglalkozik. A 100 T alatti, 10^{-3} – 1 mp időtartamú terek alkalmazása rendszerint nem jár együtt a kísérleti lerendezés megsemmisülésével, míg a 100 T feletti, 10^{-6} mp idejű terek a Joule-hő és a mechanikai feszültségek következtében roncsoló hatásúak. Ezeket a tereket főleg a szilárdtestfizika, ezen belül is a félvezető kutatás alkalmazza nem-lineáris folyamatok, magnetotranszport jelenségek, elektron rezonanciák, optikai jelenségek, exciton spektrumok vizsgálatára. Újabban a nagysűrűségű plazma rövid idejű befogására végzett impulzustérű kísérletek egy új típusú, reverzibilis implóziós-fúziós reaktor megvalósítását hozzák közelebb.

A nagy mágneses terek alkalmazása a tudomány és a technika számos területén hozott már jelentős eredményeket és a fejlődés a jövőben is folytatódik. Ennek útjaira és problémáira is rávilágít ez a kötet, amit haszonnal forgathatnak fizikusok, biológusok, gépész- és villamosmérnökök egyaránt.

Pardavi Márta

V. I. Krinsky (editor): *Self-Organization-Autowaves and Structures Far from Equilibrium*
Proceedings of an International Symposium, Puschino, USSR, July 18–23, 1983.
 Springer-Verlag, Berlin–Heidelberg–New York–Tokyo, 1984.

A Springer Kiadó szinergetikai sorozatának 28. köteteként jelent meg ez a gyűjtemény, mely a Puskinóban 1983 júliusában tartott nemzetközi konferencia anyaga. A szinergetikába, a makroszkopikus térbeli, időbeli és funkcionális struktúrák kialakulásával, tulajdonságaival foglalkozó tudományba is beletartozik, lévén hogy ez a gyűjtemény olyan rezgő rendszerekkel foglalkozik, melyekben a belső energiadiSSIPációját valamilyen többé-kevésbé folyamatos utánpótlás megfelelő „önszerveződés” útjain fedezi. Ezek a rezgőfolyamatok térbeli tovaterjedés esetén a terjedés közben találhatják meg a szétszóró forrásokból az energiautánpótlási lehetőséget a disszipációs veszteségek pótlására. És máris a Belouszov–Zsabotyinszkij-reakciónál fellépő rezgési és tovaterjedési folyamatnál vagyunk a kémiában. Ez a kötet H. Hakennek a szinergetika (1983. évi) helyzetéről adott beszámolója és V. I. Krinskynek az „önfenntartó rezgő rendszerek”-ről nyújtott általános áttekintése után külön-külön csoportosítva kínálja a fizika, a kémia, a biológia területéről az elhangzott előadásokat, közben egy fejezet az ilyen rezgő rendszerek matematikai problémáival kapcsolatban,

majd a zárófejezet az önszerveződés és evolúció általánosabb kérdéseit feszegeti. A fizikai szektorban 13 előadás, a matematikaiban 7, a kémiaiban 10, a biológiában 9, az önszerveződés és evolúció szektorcím alatt 4 előadás szerepel. A kötet tárgyi spektruma még ennél is szélesebb, az irreverzibilis termodinamikától (I. Prigogine), a kozmológián (J. B. Zeldovics), a lézerfizikán, a mágneses és félvezető anyagok fizikáján, a turbulencián keresztül, a kémiai, biológiai (a kardiális aritmiák, ekológia, epidemiológia, ..., a fág—bakterium-rendszer populációs modellje, ...) kérdésein ível át, mondjuk, az információ — a kérdéses rendszerben reprezentált — értékének megragadásáig. A 263 oldalas kötet eme rövid terjedelmében egyszerre jelent fontos új információt a konkrét kérdést kutató specialisták egy-egy csoportjának és ugyanakkor interdiszciplináris fantáziastimulációt a lényegében közös megközelítés eredményeinek és problémáinak bemutatásával.

A kötet magyar vonatkozása, hogy benne Kőrös E., Varga M. és Pauló T. „Jód által indukált rezgések nemkatalizált bromátoszillációkban” c. előadása is szerepel.

Abonyi Iván

**C. Truesdell: Rational Thermodynamics.
Second edition, Springer-Verlag, 1984.**

A jelen könyv a szerző 1968-ban kiadott, fizikus körökben újszerű gondolatai, éles kritikái miatt hamar népszerűvé vált „Rational Thermodynamics” c. könyvének második kiadása, abban az értelemben, hogy az előző kiadás a jelen könyvben lényegében változatlan formában (stilisztikai korrekcióktól eltekintve) megtalálható, ugyanakkor ez a jelenlegi 598 oldalas könyvből csak 167 oldalt jelent.

A könyv többi része a szerző, illetve a racionális termodinamika területén dolgozó nemzetközi kutatógárda által írt kiegészítések (18 Appendix), amelyek aktuális problémák elméleti kérdéseit, illetve a racionális termodinamika alkalmazási lehetőségeit mutatják be. A jelen könyv, mint ahogy a szerző is figyelmezteti olvasóit, egy fejlődő tudomány pillanatfelvétele.

A jelenlegi termodinamikai irányzatok sok féle szempont szerint csoportosíthatók. A racionális termodinamika viszonya a többi megközelítéshez talán legjobban a termodinamikai paraméterek értelmezhetőségi feltételeinek megadásában tükröződik. Ilyen szempontok alapján durván 3 csoportba sorolhatjuk az irányzatokat: klasszikus, irreverzibilis és racionális.

Klasszikus termodinamika egyensúlyi rendszerekre definiálja a paramétereket (végtelen hosszú idő; végtelen lassú, kvázisztatikus folyamatok); az irreverzibilis termodinamika a lokális (celluláris) egyensúlyhipotézis alapján megengedi a véges sebességű folyamatokat (az elmélet önkonzisztenciája garancia az alkalmazhatóságra); a racionális termodinamika azt mondja ki, hogy a körülöttünk levő világ olyan, hogy a termodinamikai állapotjelzők majdnem mindenütt, és minden folyamatra értelmezhetők. Ez utóbbi megközelítés pl. megkönnyíti a memóriával rendelkező rendszerek tárgyalását.

A könyv tartalma is három csoportra osztható, termodinamika történet, racionális termodinamika elméleti problémái és alkalmazása.

A termodinamika történettel foglalkozó részt mindenkinek ajánljuk olvasásra. Csodálatos stílus, lenyűgöző tényanyag, de „Minden tudománynak van tradíciója és története” írta Truesdell a bevezető mondataiban. A termodinamika történeti fejtegetései ugyan újszerűek, de csak tradíciók lehetnek, mivel a másik két irányzatot természetes helyükről kiragadott idézetek alapján bírálja, a racionális termodinamika fogalomkörén belül, s így „jogosan” csodálkozik a múlt (és jelen) termodinamikusainak vakságán. Pl. Onsager munkásságát bíráló fejezetének minden szava igaz, de nem ez volt Onsager munkásságának lényege.

A 8., 9., 10. fejezetek a kinetikus elmélet termodinamikai aspektusainak tárgyalásához nagyon jó bevezetőt adnak.

A racionális termodinamika módszereinek megismerését ajánljuk mindazoknak, akik a termodinamika elveit mélyen megszeretnék ismerni (külön kiemelendők a II. főtétellel kapcsolatos matematikai analízisek, pl. Coleman, Feinberg, Silhavy), valamint azoknak akik a termodinamikai módszereket reális kontinuumokra alkalmazzák.

Dr. Martinás Katalin

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó és Nyomda főigazgatója
Műszaki szerkesztő: Sándor István
A kézirat a nyomdába érkezett: 1986. márc. 10. — Terjedelem: 8,4 (A/5 ív)
86-1229 — Szegedi Nyomda — Felelős vezető: Surányi Tibor igazgató

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Tüttő István</i> : Roton—roton kölcsönhatás elmélete a szuperfolyékony He ₄ -ben	293
<i>Groma István</i> : Megolvadási és megszilárdulási problémák plazmaszórásnál	363
<i>Kálmán Péter—Lovas István</i> : Lézer indukált atommag átmenetek	373 ✓

KÖNYVISMERTETÉS

<i>P. Hammerling, A. B. Budgor and A. Pinto</i> (eds): Tunable Solid State Lasers	379
<i>Zeldovich, Pilipetsky, Shkunov</i> : Principles of Phase Conjugation	380
<i>D. Berényi and G. Hock</i> (eds): High-Energy Ion-Atom Collision Processes	380
<i>A. F. Alexandrov—L. S. Bogdankevich—A. A. Rukhadze</i> : Principle of Plasma Electrodynamics	380
<i>J. Bourgoin, M. Lannoo</i> : Point Defects in Semiconductors II	381
<i>Ole G. Mouritsen</i> : Computer Studies of Phase Transitions and Critical Phenomena	382
<i>Wolfgang Pauli</i> : Wissenschaftlicher Briefwechsel mit Bohr, Einstein, Heisenberg u.a. Bd. II. ...	383
<i>Norbert Straumann</i> : General Relativity and Relativistic Astrophysics	383
<i>S. W. Lovesey, U. Balucani, F. Borsa and V. Tognetti</i> (eds.): Magnetic Excitations and Fluctuations	384
<i>Szabó S. András</i> : Radioökológia és környezetvédelem	385
<i>F. Herlach</i> : Strong and Ultrastrong Magnetic Fields and Their Applications	385
<i>V. I. Krinsky</i> (editor): Self-Organization-Autowaves and Structures Far from Equilibrium	386
<i>C. Truesdell</i> : Rational Thermodynamics	387

307.226

IV. 9
h^o

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

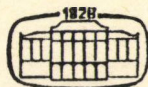
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXIV. KÖTET

5. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1986

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló ellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet
1444 Budapest VIII., Postafiók 263.

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 90 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21, (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32, (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetésnek csak a gondolatmenetet és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, síma fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

DIELEKTROMOS PERMITTIVITÁS ÉS DIPÓLRELAXÁCIÓ NEMATIKUS ÉS SZMEKTIKUS FOLYADÉKKRISTÁLYOKBAN*

BUKA ÁGNES

KFKI, Szilárdtestfizikai Kutató Intézet, Budapest

TARTALOM

Bevezetés	389
I. Folyadékkristályos szerkezetek	391
I.1. Nematikus fázis	391
I.2. Szmeztikus fázis	392
I.3. Indukált szmeztikus fázis	395
II. Dielektromos vizsgálati módszer	396
II.1. Izotróp folyadékok	396
II.2. Anizotróp, folyadékkristályos szerkezetek	398
III. Az irodalom bírálata, célkitűzések	400
IV. Kísérleti technika	402
IV.1. A vizsgált vegyületek kiválasztása	402
IV.2. Mintakészítés, rendezés	403
IV.3. Kísérleti elrendezés és mérésiértékelés	406
IV.3a Impedanciamérés kis frekvenciákon	407
IV.3b Impedanciamérés URH és mikrohullámú tartományban	409
V. Sztatikus permittivitás és vezetőképesség	410
VI. Dielektromos diszperzió	414
VI.1. Izotróp folyadékfázis	414
VI.2. Folyadékkristály fázis	417
VI.2a A javasolt modell	419
VI.2b Molekulatengellyel párhuzamos dipólmomentum esete	420
VI.2c Molekulatengellyel tetszőleges szöget bezáró dipólmomentum	423
VII. A rétegszerkezet kialakulásának szerepe	429
VIII. Indukált szmeztikus fázisok	435
VIII.1. Közeli és hosszútávú kölcsönhatások	436
VIII.2. Aktiválási energia és termikus stabilitás	438
Összefoglalás	442
Köszönetnyilvánítás	444
Függelék	444
Irodalom	446
Az értekezés témakörében megjelent publikációk	447

BEVEZETÉS

Az anyag folyadékkristályos állapotának felfedezése után több évtized telt el, amíg az érdeklődés ismét a témára irányult, amit részben a fázis különleges adottságaiból származó, újszerű, tudományos kérdések megjelenése indokolt, részben pedig a benne rejlő széles körű alkalmazási lehetőségek. Használunk folyadékkristá-

* Érkezett: 1984. szeptember 3. Kandidátusi értekezés.

lyokat a gyógyászatban, farmakológiában, bűnüldőzésben és számos egyéb területen.

Elsőpró karriert futottak be a folyadékkristály kijelzők, amit a minimális energiafelhasználás és az alacsony előállítási ár indokolt. Megtalálhatók órákban, kézi műszerekben vagy műszerfalakba építve, digitális és analóg, fekete-fehér és színes változatban. Az alfa-numerikus megjelenítésen túl a folyadékkristályok alkalmasak képcső nélküli tv-képernyő előállítására, amit a Hitachi cég már forgalmaz fekete-fehérben és folyamatban van a színes folyadékkristályos televízió előállítása.

A folyadékkristály kijelzőkben használt elektrooptikai effektusokban, az elektromos térrel vezérelt kettőtörésben és dinamikus szórásban elsőrendű szerepe van az anyag dielektromos tulajdonságainak. A kapcsolási feszültség értékét a dielektromos anizotrópia nagysága és előjele határozza meg, és mivel ezek a vezérlő elektromos tér frekvenciájának is függvényei, ezért a kijelzőben használt vegyület dielektromos spektrumának felvétele elengedhetetlen.

Folyadékkristályok dielektromos vizsgálata ugyanakkor önálló tudományos probléma is. A komplex dielektromos permittivitás frekvenciafüggése izotróp folyadékokban közismert. A jelenség — az orientációs polarizáció nagy frekvencián tapasztalt lecsengése — a részecskék permanens dipólmomentumának külső időfüggő elektromos térben való relaxációjával kapcsolatos. A dipólmomentum (re)orientációja csak az azt hordozó részecske (molekula) elfordulásával valósulhat meg, ez a mozgás szilárd, kristályos állapotban erősen gátolt. Kristályrácsban a molekulák közötti kölcsönhatások csökkentik, vagy teljesen megszüntetik a polarizáció orientációs járulékát.

A folyadékkristályok fluiditása viszont lehetővé tesz bizonyos molekulamozgásokat, amelyek külső térben orientációs polarizációt eredményeznek. A rendszer szimmetriája azonban korlátozza a részecskék mozgását, bizonyos forgásokat kizár az izotróp állapotban még lehetséges rotációk közül. A dielektromos diszperzió anizotróp jelenséggé válik folyadékkristályokban, aminek a leírásához nem elegendő az izotróp dipólrelaxáció klasszikus elméleteinek (Debye, Onsager, Fröhlich) mechanikus alkalmazása. Ki kell választani az adott rendszer szimmetriája által engedélyezett forgásokat, amit a későbbiekben modell-alkotásnak nevezünk. Ha a modell jó, és egyenletek formájában is sikerül megfogalmazni, akkor a dielektromos diszperzió vizsgálata információgazdag, sokoldalú módszerré válik. Ennek indokai a következők:

1. Izotróp esetben a módszer alaptörekvése, hogy a dielektromos permittivitást molekuláris paraméterrel, a permanens dipólmomentummal kapcsolja össze. Anizotróp esetben a dielektromos módszer képes különböző molekulaforgásokat szétválasztani, a dipólmomentum egyes komponenseinek relaxációját elkülöníteni, ezáltal nemcsak a momentum nagysága, hanem iránya is meghatározható a permittivitás változásából.

2. Eredményes molekuladinamikai vizsgálati módszerré válik, hiszen a dipólrelaxációk molekulaforgásokon keresztül valósulnak meg.

3. Szerkezetmeghatározásra is alkalmas, mert bizonyos forgások megjelenése vagy „befagyása” fázisátalakulások során szimmetriaelemek megváltozására enged következtetni.

Folyadékkristályok dielektromos viselkedésének vizsgálatát a módszerben rejlő lehetőségek felismerése nyomán indítottuk el. A témaválasztást az is indokolta, hogy az 1970-es évek elejéig hiányzott az irodalomból az anizotróp rendszerek frekvencia-

függő permittivitásának mind elméleti leírása, mind pedig szisztematikus kísérleti munkáról tanúskodó adatok.

Az értekezés V—VIII. részeiben ismertetjük a témában végzett kutatásaink eredményeit. Az I. és II. részben leírt irodalmi áttekintés után a III. rész tartalmazza célkitűzéseinket, amit a kísérleti technika ismertetése követ a IV. részben.

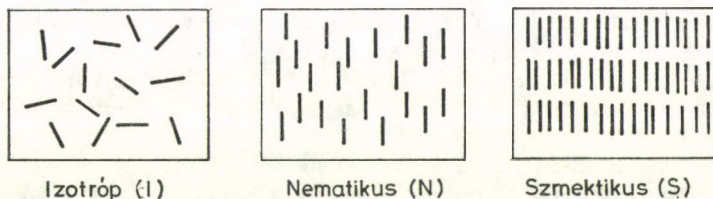
I. FOLYADÉKKRISTÁLYOS SZERKEZETEK

Folyadékkristálynak nevezzük az anyagnak azt az állapotát, amely az izotróp folyadék (I) és a szilárd kristály (K) közötti hőmérséklet-intervallumban alakul ki, és tulajdonságait tekintve mindkét fázisra emlékeztet:

— kristályként viselkedik, mert benne hosszútávú irányrendezettség van, aminek következtében optikailag kettőtörő, és mágneses, dielektromos, transzport stb. tulajdonságai anizotrópak,

— ugyanakkor az anyag viszkózus folyadék, kis mennyiségben csepp alakot vesz fel.

A folyadékkristály tág kategória, a bele tartozó anyagok között vannak pl. aktív szénatomot tartalmazó spirál szerkezetű vegyületek, makromolekulák bizonyos oldata (liotróp folyadékkristályok) és korong alakú, oszlopos felépítésű szerkezetek. Az értekezésben csak két típussal, a termotróp nematikus és szmektikus fázissal foglalkozunk (1. ábra). Mindkettőre jellemző, hogy hosszúkas, pálcika alakú, merevnek tekinthető szerves molekulákból épül fel [1].



1. ábra. Pálcika alakú molekulákból felépülő folyadékkristály szerkezetek
sematikus rajza

I.1. Nematikus fázis

A nematikus (továbbiakban: N) folyadékkristály alacsony viszkozitású, zavaros folyadék, benne a molekulák egymással párhuzamosan rendeződnek egy kitüntetett irányban, amelyet egy egységvektorral — direktorral — jelölünk (\mathbf{n}). A direktor kristallográfiai szimmetriaelem, a molekulatengelyek orientációs eloszlásfüggvényének szimmetriatengelye, a molekulák átlagos iránya. Az N fázis \mathbf{n} körül henger-szimmetrikus, benne \mathbf{n} és $-\mathbf{n}$ iránya nem különböztethető meg. A molekulák tömegközéppontjainak eloszlása az N rendszerben véletlenszerű.

A rendezettség mértékét az orientációs rendparaméter, S_0 jellemzi, amit úgy kell definiálni, hogy értéke nullává váljon az $N-I$ fázisátalakulásnál. A rendpara-

méter akkor felel meg leginkább a követelményeknek, ha a következőképpen határozzuk meg [1]:

$$S_\theta = \langle P_2(\cos \theta) \rangle = \frac{1}{2} \langle 3 \cos^2 \theta - 1 \rangle, \quad (1)$$

ahol $P_2(\cos \theta) = \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1)$ másodfokú Legendre-polinom. Ideális nematikus rend esetén $S_\theta = 1$, izotróp folyadékfázisban pedig $S_\theta = 0$.

Az N fázis eddig legsikeresebb molekulastatisztikus elméletét *Maier* és *Saupe* [2] dolgozta ki. Modelljükben diszperziós erőkkel jellemezték az anizotróp molekulák közötti kölcsönhatást. A megoldást átlagtér közelítésben adták meg, amely szerint minden molekula egy $U(\cos \theta)$ átlagpotenciált érez:

$$U(\cos \theta) = -U_0 P_2(\cos \theta) \langle P_2(\cos \theta) \rangle, \quad (2)$$

ahol $U_0 > 0$, θ -tól független tag, az intermolekuláris kölcsönhatások amplitúdója. (2) alapján felírható az irányeloszlás függvény:

$$f(\theta) = f_0^{-1} \exp \left\{ -\frac{U(\theta)}{kT} \right\}, \quad (3)$$

ahol

$$f_0 = \int_0^{\pi/2} e^{-\frac{U(\theta)}{kT}} \sin \theta \, d\theta.$$

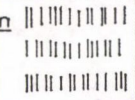
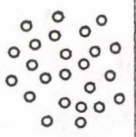
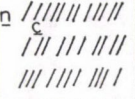


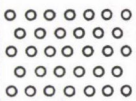
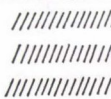

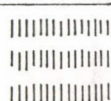
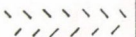
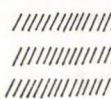
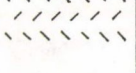
A *Maier—Saupe*-elmélet az átlagtér közelítésen túl kizárólag szimmetria-megfontolásokon alapul, aminek következtében a rendparaméter csak az $N-I$ fázisátmenet hőmérsékletétől (T_{NI}) függ, az entrópia pedig anyagtól független, univerzális tulajdonságnak adódik. Tehát a módszer nem vesz tudomást azoknak a speciális kölcsönhatásoknak a természetéről, amelyek a folyadékkristály-fázishoz vezetnek és nem veszi figyelembe a vegyületek kémiai felépítéséből eredő elkerülhetetlen különbségeket.

A modell egyszerűsége, és az a tény, hogy a kísérlettel igen jó egyezésben levő elméleti eredményekre vezet, indokolja, hogy a dolgozat későbbi fejezeteiben a *Maier—Saupe*-elméletet használjuk fel nematikus folyadékkristályok leírására.

I.2. Szmektikus fázis

A szmektikus (továbbiakban: S) szerkezet létrejöhet N fázis lehűtésekor, de kialakulhat közvetlenül izotróp folyadékból is. Az S folyadékkristály nagy viszkozitású anyag, benne a molekulák mozgékonyasága lényegesen kisebb, mint N fázisban (halmazállapota a szappanéra emlékeztet). Strukturális jellemzője a jól definiált rétegszerkezet, amelyben a molekulák hossztengetyének átlagos iránya továbbra is párhuzamos a direktorral (\mathbf{n}), a tömegközéppontok pedig síkokon helyezkednek el (1. ábra). A rétegvastagság (d) a molekulahosszal (L) összemérhető érték: 2–3 nm, ami tipikus Bragg-reflexiókat eredményez kisszögű röntgendiffrakciós kísérleteknél [3].

Szerkezet szerint többféle típus különböztethető meg a rétegen belüli rendezettség foka, valamint \mathbf{n} és a réteg normálisa által bezárt szög szerint. A dolgozatban

Fázis	Direktorral párhuzamos metszet	Direktorra merőleges metszet	Megjegyzés
S_A	\underline{n} 		2D folyadék, merőleges
S_C	\underline{n} 		2D folyadék, dőlt
S_B			hexagonális, merőleges
$S_{I(F)}$			hexagonális, dőlt
S_E			2D kristály, halszálkás, merőleges
S_G			pszeudo-halszálkás, dőlt

2. ábra. Szmeztikus fázisok szerkezeti jellemzői

szereplő S fázisokat és azok szerkezeti jellemzőit a 2. ábrán mutatjuk be, növekvő rendezettség (csökkenő hőmérséklet) sorrendjében. A latin abc nagy betűivel indexelt S fázisok lehetnek merőleges (ortogonális) vagy dőlt szerkezetek. Előbbiek esetében a direktor merőleges a rétegek síkjára, ilyen az S_A , S_B és S_E a 2. ábrán. Dőlt struktúra az S_C , S_I (vagy S_F) és S_G , mert a direktor szöget (Ω) zár be a rétegek normálisával. Ω általában hőmérsékletfüggő, hűtéskor nő. A direktorra merőleges síkban a molekulaeloszlás lehet véletlenszerű (S_A és S_C) vagy hexagonális (S_B , S_I , S_F , S_E , S_G). További szerkezeti különbséget okoz a molekulák hossz tengely körüli szabad rotációjának megszűnése, ami az egyedi részecskék hengersizmetriájának eltűnését jelenti. A molekulasíkok a 2. ábrán S_E és S_G direktorra merőleges metszetén szemléltetett irányokban állnak be, innen ered a „halszálkás” elnevezés. A bemutatott S fázisok rendezettsége az S_A -tól S_G felé (a hidegebb fázisok irányába) nő. Ezen új szimmetrialemekek megjelenését értjük. Valamennyi fázis tükörszimmetrikus, a szimmetriasík a direktorra merőleges. S_A és S_C hengersizmetrikus, \underline{n} -nel párhuzamos végtelen fogású szimmetriatengelye (C_∞) van. S_B , S_I és S_F C_6 szimmetrialemmel rendelkezik; S_E és S_G pedig három dimenzióban periodikus, valódi kristályra emlékeztető, optikailag kéttengelyű szerkezetek.

Az egyes S struktúrák azonosítása elsősorban röntgenszórással történhet [3], de a polarizációs mikroszkóp is alkalmas a különböző makroszkopikus textúrák

alapján történő megkülönböztetésre. Már azonosított fázisokkal való keveredési hajlam vizsgálata is felhasználható szerkezetmeghatározásra [4], és amint azt a dolgozat későbbi fejezeteiben látni fogjuk, a dielektromos diszperzió méréseiből kapott, molekulamozgásokra vonatkozó adatok is lényegesen különböznek egyes S szerkezeteken.

Elsősorban Sackman és Demus [5] érdeme a különböző S szerkezetek meghatározása és az előfordulás hőmérsékleti sorrendjének (fázisszekvencia) megállapítása.

A röntgendiffrakciós adatok kvantitatív analízise további részleteket szolgáltat az S struktúrákról és fázisátalakulásairól. Az $N-S_A$ átmenet — molekulától függően — különbözőképpen mehet végbe [6]:

1. $N-S_{A1}$ átmenet

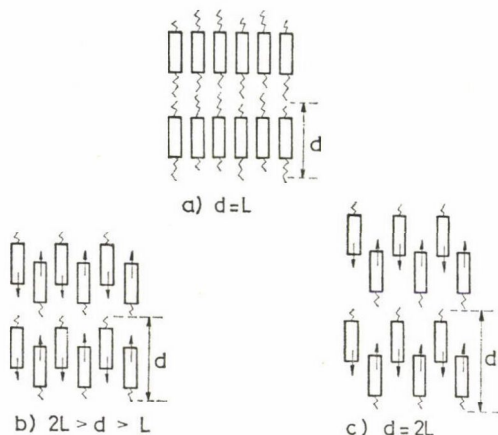
Az S_{A1} egyrétegű szerkezet, a benne kialakuló egydimenziós sűrűséghullám hullámvektora q_1 , periodicitása: $d_1 = 2\pi/q_1 \cong L$ (3a ábra).

2. $N-S_{A2}$ átmenet

S_{A2} kettősréteget jelöl, a hullámvektor q_2 mért értékei a következők lehetnek:

a) $1/2q_1 < q_2 < q_1$ — inkommenzurábilis (3b ábra).

b) $q_2 = 1/2q_1$ — kommenzurábilis (3c ábra).



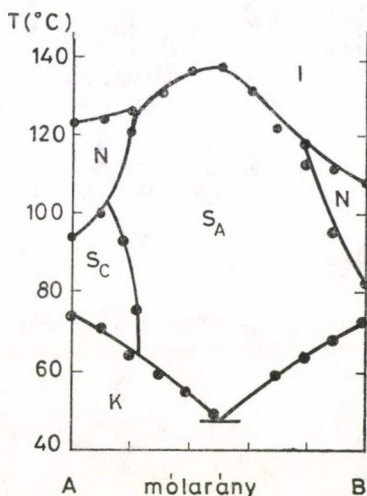
3. ábra. Kommenzurábilis (a és c), valamint inkommenzurábilis (b) rétegszerkezetek modellje. A b és c ábrán a nyilak permanens dipólmomentumot jelölnek

A röntgenszórási kísérletekből az S fázisok hosszútávú periodicitása, a rétegvastagság állapítható meg, de a rétegen belüli molekula-elrendeződésről a módszer nem nyújt információt. Mivel kettős rétegű S_{A2} szerkezeteket nagy terminális dipólmomentummal (a 3. ábrán nyilakkal jelöltük) rendelkező molekulákból álló anyagokon figyeltek meg, ezért kézenfekvő, bár vitatott, a rétegen belüli antiferroelektromos elrendeződés feltételezése [7], [8]. A probléma tisztázásában döntő szerepük van a dielektromos vizsgálatoknak, mert fényt derítenek a közeli dipól—dipól kölcsönhatásokra. A módszer segítségével eldönthető, hogy van-e a rendszerben számottevő kölcsönhatás a szomszédos momentumok között, és ha igen, akkor milyen jellegű.

I.3. Indukált szmektikus fázis

Két folyadékkristály keverékében az olvadáspont általában eutektikus viselkedést mutat, a folyadékkristály \rightarrow izotróp folyadék átalakulási hőmérséklet pedig a koncentrációval lineárisan változik.

Speciálisan megválasztott folyadékkristály komponensek keverékében a lineáristól eltérő, bonyolult fázishatárok figyelhetők meg, amire a 4. ábrán mutatunk be egy példát [35]. Szembetűnő a meglevő S fázisok stabilizálódása a keverékben, sőt az S állapotok indukálódása nem-szmektikus összetevők bizonyos koncentrációtartományában.



4. ábra. 4,4'-di-n-heptiloxibenzol (A) és 4-ciánobenzilidén 4'-n-oktiloxianilin (B) keverékének fázisdiagramja

A keverékben indukált fázisok vizsgálata során eddig megfigyelt törvényszerűségek a következők [36]:

- csak merőleges S fázisok (S_A , S_B , S_E) indukálódnak, dőlt szerkezetek nem alakulnak ki,
- az indukált fázisok szekvenciája megegyezik az egykomponensű rendszerekre megállapított fázissorrenddel,
- az indukált rétegszerkezetek egyrétegűek, kettősréteget nem figyeltek meg eddig,
- az indukció szükséges feltétele az, hogy az alkotó molekulák egyike erősen végpoláros legyen (pl. cián, nitro).

II. DIELEKTROMOS VIZSGÁLATI MÓDSZER

II.1. Izotróp folyadékok

A dielektromos vizsgálatok célja a külső elektromos térbe (\mathbf{E}) helyezett anyag reakciójának (válaszának) tanulmányozása. Egységnyi térfogatú poláros anyag dielektromos polarizációja (\mathbf{P}) külső térben:

$$\mathbf{P} = \varepsilon_0 \chi \mathbf{E} = \mathbf{P}_\alpha + \mathbf{P}_\mu, \quad (4)$$

ahol

$\chi = \varepsilon(0) - 1$ — szuszceptibilitás,

$\varepsilon(0)$ — sztatikus dielektromos permittivitás,

ε_0 — a vákuum dielektromos permittivitása,

$\mathbf{P}_\alpha = N\alpha\mathbf{E}_b$ — a molekulán belüli töltésmozdulásból eredő indukált polarizáció,

$\mathbf{P}_\mu = N(\mu_m^2/3kT)\mathbf{E}_0$ — a molekula permanens dipólmomentumának elfordulásából származó orientációs polarizáció,

N — egységnyi térfogatban levő molekulaszám.

A belső terek E_b és E_0 számolásánál Lorentz módszerét [9] követve (4)-ből a következőt kapjuk a sztatikus dielektromos állandóra [10]:

$$\varepsilon(0) = 1 + \frac{NhF}{\varepsilon_0} \left\{ \alpha + \frac{F}{3kT} \mu_m^2 \right\}, \quad (5)$$

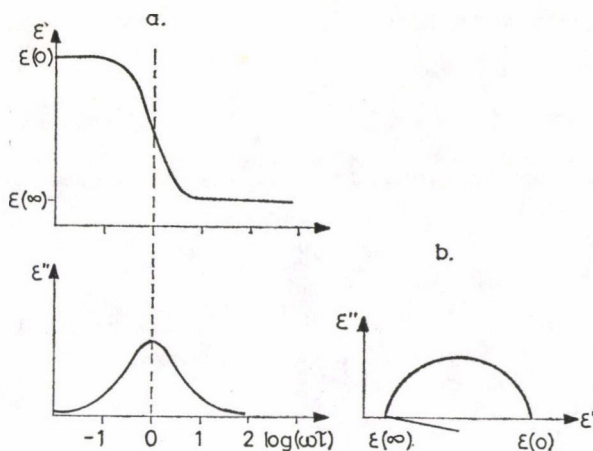
ahol h és F a permittivitástól, polarizálhatóságtól és molekulamérettől függő térkorrekciós faktorok:

$$h = \frac{3\varepsilon(0)}{2\varepsilon(0)+1}; \quad F = \frac{1}{1-f\alpha}; \quad f = \frac{2\varepsilon(0)-2}{2\varepsilon(0)+1} \cdot \frac{1}{r^3},$$

ahol r a gömbszimmetrikusnak feltételezett részecske sugara. A (4) szerinti teljes egyensúlyi polarizáció kialakulásához időre van szükség az anyagban, mivel \mathbf{P} bármely változása csak valamely inerciális tömeg elmozdulása révén valósul meg. \mathbf{P}_α -t gyors folyamatok hozzák létre, a dipólorientáció viszont lassabban megy végbe. A polarizáció dinamikájának vizsgálatára időben változó, pl. harmonikus külső tér alkalmazása célszerű. Ha $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp \{i\omega t\}$, akkor a polarizáció csak addig a frekvenciáig lesz fázisban a térrel, amíg annak periódusideje elegendő a teljes \mathbf{P} kialakulásához. Nagyobb frekvenciáknál a μ_m permanens dipólmomentumok nem követik a tér irányváltozásait és \mathbf{P}/\mathbf{E} komplexszé válik. A folyamat a dielektromos diszperzió, első leírása Debye nevéhez fűződik. A permittivitás módosított Debye-elmélet szerinti alakja a diszperziós tartományban:

$$\varepsilon^*(\omega) = \varepsilon'(\omega) - i\varepsilon''(\omega) = \varepsilon(\infty) + \frac{\varepsilon(0) - \varepsilon(\infty)}{1 + (i\omega\tau)^{1-h}}, \quad (6)$$

ahol $\varepsilon(\infty)$ a permittivitásnak az indukált polarizációból származó hányada, a ∞ a rádiófrekvenciás tartományon kívül eső, annál magasabb frekvenciákra utal, $\tau = (\omega_c)^{-1} = (2\pi f_c)^{-1}$ a relaxációs idő. A (6) egyenlet grafikus ábrázolása az 5a ábrán látható. Az 5b ábrán $\varepsilon''(\varepsilon')$ függvényét szemléltettük, amely az elmélet szerint félkört ad. A diszperzió Debye típusúnak tekinthető, ha $h=0$, ekkor a félkör középpontja a valós tengelyen van, Cole—Cole típusú, ha $0 < h < 1$, és a középpont a tengely alá kerül.



5. ábra. a) A komplex permittivitás reális és képzetes részének frekvenciafüggése, b) Cole—Cole diagram

Kísérletileg meghatározható ϵ' és ϵ'' frekvenciafüggése, amiből (6) alapján kiszámolható a dipólrelaxációs idő: τ , és a diszperzió intenzitása: $[\epsilon(0) - \epsilon(\infty)]$ — a dielektromos növekmény. Izotróp folyadékok esetén a Debye diszperzió általában a rádiófrekvenciás tartományban van, $\tau = (10^{-8} - 10^{-9})$ s, az intenzitás pedig a relaxáló dipólmomentum nagyságának függvénye.

Felhasználva a Clausius—Mossotti-egyenletet [10], α kifejezésére a nagyfrekvenciás permittivitáson $\epsilon(\infty)$ keresztül, (5)-ből megkapjuk az Onsager-egyenletet:

$$[\epsilon(0) - \epsilon(\infty)] \frac{2\epsilon(0) + \epsilon(\infty)}{\epsilon(0)[\epsilon(\infty) + 2]^2} = \frac{N}{9\epsilon_0 kT} \mu_{\text{ons}}^2. \quad (7)$$

(7) kapcsolatot teremt az anyag dielektromos permittivitásának a diszperzió során történt megváltozása és a molekuláris dipólmomentum között, feltételezve, hogy a részecskék gömb alakúak és nincs közöttük kölcsönhatás.

A frekvenciafüggő komplex permittivitás leírására a modern statisztikus fizika, *Kubo* lineáris válaszelmélete teremtett új lehetőséget [12].

Az elmélet kidolgozásával többen foglalkoztak [13]—[16], a levezetés fontos lépései a következők:

a rendszer teljes Hamiltoniánja:

$$H = H_0 + H',$$

ahol H_0 leírja az egyensúlyi, külső tér nélküli rendszer fluktuációit, H' pedig adott időpillanatban bekapcsolt külső tér által létrehozott perturbáció.

Periodikus elektromos térbe helyezett dielektrikum esetén:

$$H' = \mathbf{P} \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t}.$$

Keressük a rendszer válaszát $\mathbf{E}(t)$ hatására. Gyenge külső tér esetén a polarizáció-változás lineáris a térrel:

$$\mathbf{P}(t) = \int_0^t F(t-t') \underline{\mathbf{E}}_0 e^{i\omega t'} dt', \quad 0 \leq t' \leq t$$

$F(t-t')$ neve válaszfüggvény. Innen a rendszer komplex szuszceptibilitása:

$$\chi(\omega) = \int_0^\infty F(\tau) e^{-i\omega\tau} d\tau.$$

A lineáris válaszfüggvényt a klasszikus statisztikus fizikában a sűrűségmátrix mozgásegyenletéből lehet levezetni, aminek eredményeként $F(\tau)$ időkorrelációs függvényalakot vesz fel, és *Kubo-formulaként* ismert:

$$F(\tau) = -\frac{1}{kT} \langle \underline{\mathbf{P}}(0), \dot{\mathbf{P}}(\tau) \rangle.$$

A $\langle \rangle$ a külső tér nélküli, egyensúlyi irányeloszlás függvény szerinti átlagolást jelent. A dielektromos relaxáció molekuláris értelmezése megkívánja, hogy a komplex permittivitást ne makroszkopikus mennyiségekkel, hanem az egyedi molekulára vonatkozó mikroszkopikus korrelációs függvénnyel kapcsoljuk össze. Ennek érdekében a polarizációt egy térfogatelemben található molekuláris momentumok $\underline{\mu}_i$ vektoriális összegeként írjuk fel:

$$\mathbf{P} = \sum_{i=1}^N \underline{\mu}_i.$$

Behelyettesítve megkapjuk lineáris, izotróp, kondenzált dielektrikum frekvenciafüggő, komplex permittivitását molekuláris, dipól korrelációs függvényeken keresztül:

$$\varepsilon^*(\omega) - \varepsilon(\infty) = \frac{A}{\varepsilon_0 kT} \mathcal{L}\{-\dot{F}(t)\} = -\frac{A}{\varepsilon_0 kT} \int_0^\infty \frac{dF(t)}{dt} e^{-i\omega t} dt, \quad (8)$$

ahol $F(t) = \langle \mu(0) \mu(t) \rangle$ — dipól korrelációs függvény,

$\langle \rangle$ — a zárójel irány szerinti termikus átlagolást jelent,

A — a dielektrikum belsejében ható és a külső tér közötti korrekciós faktor.

A (8) kifejezés $\varepsilon^*(\omega)$ -t a molekuláris reorientációk által előidézett időfüggő polarizáció-fluktuációkon keresztül adja meg.

II.2. Anizotróp, folyadékkristályos szerkezetek

Onsager és Debye elméletét *Maier* és *Meier* [17] terjesztette ki N folyadékkristályok sztatikus dielektromos viselkedésének leírására. Anizotróp polarizálhatóságot α és permittivitást ε vezettek be, és a molekula tengelyével β szöget bezáró dipól-momentummal $\mu_m = \mu_l + \mu_q$ számoltak. Figyelembe vették, hogy a molekulaorientációt a külső elektromos tér és a nematikus potenciál együttes hatása vezérli.

Az indukált és permanens momentumok direktorral párhuzamos és arra merőleges vetületeinek várható értékét kiszámolva a N rendszerben az (5) kifejezés mintájára a következő adódott:

$$\varepsilon_\lambda(0) = 1 + \frac{N h F}{\varepsilon_0} \left\{ \langle \alpha_\lambda \rangle + \frac{F}{3 k T} \langle \mu_\lambda^2 \rangle \right\}, \quad (9)$$

ahol $\lambda = \parallel$ vagy \perp ,

$$\langle \alpha_\lambda \rangle = \begin{cases} \bar{\alpha} + \frac{2}{3} \alpha_a S_\theta & \lambda = \parallel \\ \bar{\alpha} - \frac{1}{3} \alpha_a S_\theta & \lambda = \perp \end{cases},$$

$$\bar{\alpha} = (\alpha_l + 2\alpha_q)/3; \quad \alpha_a = \alpha_l - \alpha_q,$$

l, q — molekulához rögzített koordináták,

$$\langle \mu_\lambda^2 \rangle = \begin{cases} \mu_m^2 [1 - (1 - 3 \cos^2 \beta) S_\theta] & \lambda = \parallel \\ \mu_m^2 \left[1 + \frac{1}{2} (1 - 3 \cos^2 \beta) S_\theta \right] & \lambda = \perp \end{cases}$$

h és F alakja azonos az (5)-ben izotróp esetre megadottal, de ε helyét $\bar{\varepsilon} = (\varepsilon_\parallel + 2\varepsilon_\perp)/3$, α helyét $\bar{\alpha}$ veszi át.

Az (5) kifejezésnek anizotróp esetre való kiterjesztése (9) alakban több elhanyagolást tartalmaz, és csak első közelítésben állja meg a helyét.

A Maier—Meier-elmélet a Debye-analízis valamennyi hiányosságával is rendelkezik. Nem számol a rövidtávú kölcsönhatásokkal, amit Bordewijk [18] igyekezett korrigálni, a Kirkwood—Fröhlich-egyenlet alkalmazásával. Figyelembe vette, hogy a poláros rendszerekben a dipól—dipól korreláció dominál a lehetséges közeli kölcsönhatások között. Anizotróp korrelációs faktort vezetett be: g_\parallel és g_\perp komponensekkel. Ezek kvantitatív számolásánál azonban ideális távoli rendet ($S_\theta = 1$) tételezett fel, ami kétséges teszi elméletének alkalmazhatóságát reális folyadékkristály rendszerek sztatikus dielektromos tenzorelemeinek meghatározására. Figyelemre méltó azonban egyes folyadékkristályok $N-S_A$ fázisátalakulásnál tapasztalt anomális dielektromos viselkedésének dipól—dipól kölcsönhatás megváltozásával való értelmezése.

A dielektromos relaxáció leírására folyadékkristályokban a (8) analógiájára a következő kifejezést használjuk [10]:

$$\varepsilon_\lambda^*(\omega) - \varepsilon_\lambda(\infty) = -\frac{A_\lambda}{\varepsilon_0 k T} \int_0^\infty \frac{dF_\lambda(t)}{dt} e^{-i\omega t} dt, \quad (10)$$

ahol az $F_\lambda(t)$ korrelációs függvény irányfüggő, mert folyadékkristályokban a dipól-momentum várható értéke $\langle \mu(t) \rangle$ adott $\mu(0)$ esetén függ $\mu(0)$ -nak a direktorral bezárt szögétől, ellentétben az izotróp folyadékokkal. A (10) összefüggés azt fejezi ki, hogy a folyadékkristályok makroszkopikus relaxációs viselkedése ($\varepsilon_\lambda^*(\omega)$) is leírható molekuláris korrelációs függvények segítségével. Mindazonáltal a (10) kifejezés csupán recept, alkalmazása konkrét folyadékkristály rendszerre a következő lépésekben történik:

1. A molekulák rotációs mozgására modellt kell konstruálni és azt egyenletek formájában megfogalmazni.
 2. Meg kell oldani a mozgásegyenletet, a megoldás meghatározza az orientációs eloszlásfüggvényt.
 3. Az eloszlás ismeretében ki kell számolni az $F_\lambda(t)$ korrelációs függvényt.
 4. El kell végezni a Laplace-transzformációt.
 5. Meg kell adni az A_λ térkorrekciós faktorokat.
- A feladatnak ilyen teljes megoldása folyadékkristály rendszerekre tetszőleges helyzetű dipólmomentum esetére nem található az irodalomban.

Speciális esetekre számolt részmegoldások léteznek, ezek közül *Martin*, *Meier* és *Saupe* (MMS) [19] elméletét említjük meg, mert a szerzők első ízben javasoltak konkrét molekuladinamikai modellt folyadékkristályok dielektromos relaxációjára. Felismerték, hogy döntő szerepet játszik a molekula rövid tengelye körüli átfordulás, amely mozgást a nematikus potenciál gátolja, ezért alacsony frekvencián jelentkezik. Kimutatták, hogy szimmetria okokból hatása csak a párhuzamos orientációban látható. Az elmélet a dipólmomentumnak csak a molekulatengely irányába eső vetületének (μ_l) relaxációjával foglalkozik, amit a merőleges komponens mozgásától függetlennek tekint. Módszerében a Debye-elméletet követi, figyelembe véve a nematikus rend kialakulásáért felelős Maier—Saupe-potenciált, és megadja μ_l relaxációjának hatását a szuszceptibilitásra a direktorral párhuzamos és arra merőleges irányban. A számolás mindkét orientációban egy-egy diszperziós folyamatot eredményezett.

III. AZ IRODALOM BÍRÁLATA, CÉLKITŰZÉSEK

Az MMS elmélet megjelenésének idején (1971) kísérleti ellenőrzésre csak a dialkoxi azoxibenzol homológ sor néhány tagján végzett mérések [20] álltak rendelkezésre. Ezen anyagok teljes rádiófrekvenciás spektruma merőleges orientációban egy (\perp), párhuzamosban pedig két, egymástól határozottan elkülönülő diszperziót ($\parallel-1$ és $\parallel-2$) tartalmazott. A tapasztalt viselkedést a 14. ábrán mutatjuk be. A dialkoxi azoxibenzolok molekuláris dipólmomentuma három poláros csoport járulékából tevődik össze. A részmomentumok mindegyikének van tengelyre merőleges komponense (μ_q), ami nyilvánvalóan járulékot ad a \perp diszperzióhoz. Így az MMS elméletben megjósolt folyamatok közül csak a párhuzamos orientációban kapott relaxáció hasonlítható össze a fenti vegyületek $\parallel-1$ diszperziójával, mert ebben csak μ_l járuléka szerepel. A $\parallel-1$ folyamat több nagyságrenddel alacsonyabb frekvencián jelentkezik, mint az izotróp diszperziós tartomány és specifikusan folyadékkristályos jelenségnek tekinthető. Az a magyarázat, hogy a molekulák rövid tengelye körüli átfordulás okozza, minden tekintetben megállta a helyét. A modellből kapott relaxációs idő értékét és annak hőmérsékletfüggését az ellenőrző kísérletek alátámasztották.

A $\parallel-1$ diszperziós folyamat helyes értelmezése kétségtelenül az MMS elmélet legnagyobb érdeme. Hiányossága azonban, hogy nem foglalkozott a dielektromos növekmény meghatározásával, valamint a \perp és $\parallel-2$ folyamatok értelmezését rossz irányba terelte. Ehhez hozzájárult a kísérleti adatok igen korlátozott mennyisége is, nem állt rendelkezésre választék különböző felépítésű — dipólmomentumú — molekulákon felvett dielektromos spektrumokból. Idővel nőtt ugyan a különböző

folyadékkristály-vegyületeken végzett mérések száma, de a vizsgálatok kizárólag a $\parallel-1$ folyamatra korlátozódtak.

A következő nézet alakult ki a megfigyelt folyamatokról:

- $\parallel-1$ — a molekula rövid tengelye körüli átfordulás okozza, termikusan aktivált folyamat. Az MMS elmélet erre vonatkozó eredményeit egyéb vegyületeken végzett mérések is igazolták.
- $\parallel-2$ — mérési adat csak a dialkoxi azoxibenzolokon állt rendelkezésre, és mivel az elmélet nem adott támpontot az értelmezésre, így intramolekuláris forgással, a poláros alkoxi láncok molekulatengely körüli rotációjával magyarázták.
- \perp — ebben a folyamatban μ_q relaxációja dominál, ami legegyszerűbben a molekula hossz tengelye körüli forgással valósulhat meg.

Folyadékkristályok dielektromos diszperziójának fenti modelljét a tudományos közvélemény elfogadta.

A témába való bekapcsolódásunk időpontja kb. egybeesett az alkil ciano bifenilek (nCB) megjelenésével [21]. Ezek a vegyületek új korszakot nyitottak a folyadékkristály-kutatásban és -felhasználásban, amihez többek között hozzájárult stabilitásuk és szobahőmérséklethez közeli olvadás- és feltisztulási pontjuk. A dielektromos vizsgálatok történetében azért jelentettek mérföldkövet, mert molekuláris dipólmomentumuk egyetlen poláros csoporttól, a ciántól származik, ami mereven kapcsolódik a bifenil tengelyéhez. Az nCB molekula nem tartalmaz mozgékony, poláros láncokat, és a dipólmomentumának csak molekulatengellyel párhuzamos komponense van ($\mu_m = \mu_l$ és $\mu_q = 0$).

Felismertük, hogy az alkil ciano bifenilek alkalmasak a diszperzió magyarázatra kialakított hipotézis ellenőrzésére. Már a kísérletek elvégzése előtt kételkedtünk abban, hogy valamely intramolekuláris mozgás hatása a rádiófrekvenciás tartományban jelentkezzen. Nem fogadtuk el a dialkoxi azoxibenzolok $\parallel-2$ diszperziójára adott magyarázatot. Ezért mérősorozat elindítását terveztük, hogy igazoljuk elképzeléseinket, és ezzel egy időben a korábbi modell részleges felülvizsgálatát is feladatunknak tekintettük.

A kísérleteknél törekedtünk a teljes dielektromos spektrum felvételére, nem hanyagoltuk el a mikrohullámú tartományban jelentkező folyamatokat. Meggyőződésünk, hogy az alacsony frekvenciás, speciálisan folyadékkristályos diszperzió vizsgálata csak részleges információt szolgáltat. A teljes spektrum szükséges ahhoz, hogy egyértelmű kapcsolatot teremtsünk a molekuláris paraméterek és makroszkopikus jellemzők között.

Célunk az volt, hogy olyan molekuladinamikai modellt javasoljunk, amely tetszőleges dipólmomentum és molekulaszervezet esetén magyarázza a N folyadékkristályok dielektromos viselkedését. Ugyanakkor széles körű kísérleti vizsgálatokat terveztünk, lehetőleg minél több, különböző típusú és molekulaszervezetű vegyületen.

Természetszerűen kínálkozott ugyanezeket a célkitűzéseket az időközben folyamatosan megjelenő különböző szmektikus fázisokra is kiterjeszteni. Szmektikus folyadékkristályok dielektromos vizsgálatával egyéb kutatóhelyeken szinte egyáltalán nem foglalkoztak. Ennek oka az volt, hogy a folyadékkristályok dielektromos viselkedésének vizsgálatát a kijelzőkben való alkalmazás tette szükségessé és fontossá, ezáltal irányt szabva a kutatásoknak. Ezért a vizsgálatoknak szinte kizárólag N rendszereket, vagy azoknak a kijelzőkben közvetlenül felhasználható elegyeit vetették

alá. Felismertük, hogy S struktúrák dielektromos vizsgálata új tudományos kérdések megoldását jelenti, a módszer hozzájárulhat szerkezetvizsgálati és molekuladinamikai problémák tisztázásához. A témában végzett kutatásaink és azok eredményei azóta is egyedülállónak tekinthetők az irodalomban.

A dielektromos vizsgálati módszert alkalmaztuk többkomponensű folyadékkristály rendszerek tanulmányozására is. A keverékek vizsgálata révén kapcsolódunk be olyan újkeletű jelenségek kapcsán felmerülő problémák tisztázásába, mint a fázisindukció, egy- és kétrétegű, kommenzurábilis és inkommenzurábilis szmektikus struktúrák kialakulása és a közeli dipól–dipól kölcsönhatás szerepének vizsgálata $N-S$ fázisátalakulásnál.

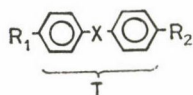
IV. KÍSÉRLETI TECHNIKA

IV.1. A vizsgált vegyületek kiválasztása

Célunk az volt, hogy megtaláljuk folyadékkristályok dielektromos viselkedésében az általánosítható vonásokat, ezért sokféle vegyületen végeztünk méréseket.

Az anyagkiválasztás szempontjai és a mintaelőkészítés állomásai a következők voltak:

a) Elsődleges szerepet a molekula permanens dipólmomentumának nagysága és iránya játszott. Mindkét mennyiséget lehetőleg széles tartományban igyekeztünk változtatni, amihez a molekulaszervezet ismerete szükséges. A tipikus folyadékkristály anyag molekulafelépítése a következő:



A T -vel jelölt középső rész alkotja a molekula merev törzsét és meghatározza a hossz-tengely irányát, amit az aromás gyűrűket összekötő egyenessel közelítettünk. R_1 és R_2 általában szénhidrogén láncokat jelöl és a folyadékkristály fázis fluiditását biztosítja. A gyakran előforduló csoportok és momentumaik az I. táblázatban láthatók. A benzolgyűrű szimmetrikus, apoláros elem, dipólmomentuma R_1 -nek, R_2 -nek és X -nek lehet.

Ezen híd (X) és végcsoportok (R_1 , R_2) kombinálásával változtatható a molekula eredő momentuma.

b) A kiválasztott részekből „megtervezett” molekula csak akkor felel meg, ha a belőle felépülő anyag folyadékkristály fázissal, azon belül az éppen vizsgálni kívánt N vagy S szerkezetekkel rendelkezik. Szmektikusok tanulmányozásánál is elengedhetetlen az N fázis jelenléte, mert a minta rendezése csak így biztosítható.

c) Az eddigiek teljesülése esetén következik a kiválasztott anyag beszerzése, ami kereskedelmi forgalomban levő vegyületeknél a Merck és BDH cég közreműködésével valósult meg, ellenkező esetben a KFKI Szerves Kémia laboratóriumában próbálkoztunk a szintézissel, általában sikerrel. Különleges felépítésű vagy tulajdonságú anyagok beszerzésénél fontos szerepet játszottak külföldi kapcsolataink is. Kiemelendő a Halle-i Martin-Luther Egyetem Fizikai-Kémia tanszéke, ahonnan több vizsgált anyagmintánk származik.

I. TÁBLÁZAT

X, R_1, R_2	Képlet	$\mu \cdot 10^{30}$ Ccm)*	β^{**}	Megjegyzés
X hídcsoportok	—N=N—	0		apoláros
	—C≡C—	0		
	—(bifenil)	0		
	$\begin{array}{c} \text{—N=N—} \\ \searrow \\ \text{O} \end{array}$	5,66	65°	poláros, feniltengellyel szöget bezáró momentum
	$\begin{array}{c} \text{—C—O—} \\ \parallel \\ \text{O} \end{array}$	6,33	62°	
	$\begin{array}{c} \text{—C=N—} \\ \searrow \\ \text{H} \end{array}$	5,33	74°	
R_1, R_2 végláncok	$C_n H_{2n+1}$ — (n = egész szám)	~0		apoláros
	$C_n H_{2n+1}$ O—	4,33	72°	poláros, feniltengellyel szöget zár be
	N≡C— NO ₂ —	14,7 14,9	0 0	erősen poláros, tengellyel párhuzamos momentum

* lásd pl. [22]

** β = a feniltengely és μ által bezárt szög.

d) Ha a kiválasztott vegyület rendelkezésünkre áll, csak akkor használható, ha stabilitása és tisztasága megfelelő. Ezek ellenőrzését DSC-vel, illetve polarizációs mikroszkóppal végeztük, így egyidejűleg az anyag fázisait és átmeneti hőmérsékleteit is meghatároztuk.

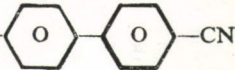
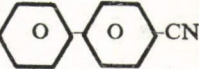









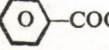
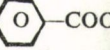
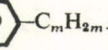
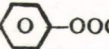
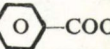
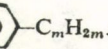
A II. táblázatban bemutatjuk a dielektromos vizsgálatoknak alávetett anyagokat és fázisátmeneti hőmérsékleteiket.

IV.2. Mintakészítés, rendezés

Az I. részben leírt folyadékkristály állapotokban megfelelő külső hatás nélkül nem alakul ki homogén szerkezet az anyag teljes térfogatában. Például N fázisban a direktor iránya folyamatosan változik a mintában [1]. Egyszerű eljárásokkal azonban létrehozható folyadékkristály „egykristály”. A dolgozatban leírt méréseknél külső mágneses teret alkalmaztunk a minta rendezésére, amelynek erőssége 1,2 T volt.

II. TÁBLÁZAT
A vizsgált vegyületek és fázisátmeneteik

Anyagtípus	Molekulaszerkezet	n	m	Vegyület* neve	Fázisok és átmeneti hőmérsékletek °C-ban
Schiff- -bázis	$C_nH_{2n+1}O-\text{C}_6\text{H}_4-\text{CH}=\text{N}-\text{C}_6\text{H}_4-C_mH_{2m+1}$	1	4	10,4 (MBBA)	K—22—N—47—I
		2	4	20,4 (EBBA)	K—35—N—80—I
		5	6	50,6	K—35—S _G —40—S _F —43—S _B —51—S _C —53—S _A —62—N—73—I
		6	6	60,6	K—30—S _B —61—S _A —76—N—80—I
Azo	$C_nH_{2n+1}O-\text{C}_6\text{H}_4-\text{N}=\text{N}-\text{C}_6\text{H}_4-OC_mH_{2m+1}$	6	6	d60 azo	K—102—N—114—I
	$C_nH_{2n+1}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{N}=\text{N}-\text{C}_6\text{H}_4-OC_mH_{2m+1}$	8	8	d80 azo	K—98—N—112—I
		4	12	4 azo 012	K—52—S _I —60—S _C —65—S _A —76—N—77—I
Dialkil azoxi	$C_nH_{2n+1}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{N}(\text{O})=\text{N}-\text{C}_6\text{H}_4-C_mH_{2m+1}$	4	4	d4AB	K—15—N—28—I
		6	6	d6AB	K—22—N—51—I
		7	7	d7AB	K—35—S _A —53—N—72—I
Dialkoxi azoxi	$C_nH_{2n+1}O-\text{C}_6\text{H}_4-\text{N}(\text{O})=\text{N}-\text{C}_6\text{H}_4-OC_mH_{2m+1}$	1	1	d10AB (PAA)	K—118—N—135—I
		4	4	d40AB	K—102—N—137—I
		6	6	d60AB	K—81—N—129—I
		7	7	d70AB	K—74—S _C —95—N—124—I

Alkil ciano bifenil	C_nH_{2n+1} — 	5	—	5CB	K—22—N—35—I
		7	—	7CB	K—29—N—43—I
		8	—	8CB	K—20—S _A —32—N—41—I
Alkoxi ciano bifenil	$C_nH_{2n+1}O$ — 	7	—	70CB	K—54—N—74—I
		8	—	80CB	K—55—S _A —66—N—80—I
Észter	$C_nH_{2n+1}O$ —  —COO—  —NO ₂	8	—	NPOOB	K—35—S _A —61—N—69—I
	$C_nH_{2n+1}O$ —  —COO—  —OC _m H _{2m+1}	10	6	DOBHOP	K—35—S _B —44—S _C —77—S _A —83—N—89—I
	$C_nH_{2n+1}O$ —  —  —COO—C _m H _{2m+1}	8	2	80BE2	K—65—S _E —83—S _B —94—S _A —110—I
	C_nH_{2n+1} —  —  —COO—  —C _m H _{2m+1}	7	5	7BEF5	K—40—S _E —57—S _B —68—S _A —139—N—148—I
	C_nH_{2n+1} —  —COO—  —COO—  —C _m H _{2m+1}	4	4	d4BB	K—89—N—183—I
	C_nH_{2n+1} —  —OOC—  —COO—  —C _m H _{2m+1}	4	4	d4FT	K—157—N—176—I

* Az anyagok elnevezése a vegyület kémiai nevének kezdőbetűiből összeállított rövidítés, pl.: MBBA = metoxi, benzilidén butil anilín vagy a végláncok hosszára utaló szénatomszám és a kezdőbetűk kombinációja, pl.: 8CB = oktil-ciánobifenil.

A mágneses tér rendező hatása a folyadékkristály diamágneses szuszceptibilitásának anizotrópiáján alapul, ami különbséget okoz a minta szabadenergia sűrűségében a direktorral párhuzamos, illetve arra merőleges külső mágneses tér esetén. Ez az energiakülönbség egyenlő: $1/2\mu_0^{-1}B^2\chi_a$ kifejezéssel, ahol B — a mágneses indukció, μ_0 — a vákuum permeabilitása és $\chi_a = \chi_{\parallel} - \chi_{\perp}$ — szuszceptibilitás anizotrópia. Mivel általában $\chi_a > 0$, a direktor a mágneses térrel párhuzamosan igyekszik beállni. Megjegyezzük, hogy a tér nem befolyásolja az egyedi molekulák orientációs fluktuációit, egy térfogatelem szuszceptibilitás anizotrópiájának kooperatív hatása az, ami lehetővé teszi a direktor orientálhatóságát.

A diamágnesség és az orientációs rend kapcsolatával folyadékkristályokban a [B13] munkában foglalkoztunk, bemutattunk számos folyadékkristály anyagon mért szuszceptibilitás adatot és azok hőmérsékletfüggését.

A dolgozatban tárgyalt, dielektromos módszerrel vizsgált folyadékkristály anyagok mindegyikére χ_a pozitív és $\approx 10^{-6}$ SI egység, ami 1 T mágneses indukció esetén $0,3 \text{ Jm}^{-3}$ értékű szabadenergia-sűrűség különbséget eredményez, és biztosítja a direktor külső térrel párhuzamos orientációját [1].

A folyadékkristály minták rendezését úgy végeztük el, hogy az anyagot izotróp folyadékfázisba fűtöttük, majd külső mágneses tér jelenlétében hűtöttük N állapotba, ahol a direktor a térrel párhuzamosan rendeződött és irányát további S fázisokba hűtve is megőrizte.

IV.3. Kísérleti elrendezés és mérésiértékelés

Ahhoz, hogy valódi, hiánytalan képet kapjunk folyadékkristályok dielektromos tulajdonságairól, követni kell a permittivitás változását a teljes rádiófrekvenciás tartományban, lehetőleg 0—100 GHz-ig, az infravörös sáv kezdetéig. Kísérletileg ez megfelelő berendezések birtokában sem könnyen megvalósítható feladat, mivel $\varepsilon^*(\omega)$ mérése elvi okokból nem végezhető el ugyanazzal a technikával különböző frekvenciákon.

A rövidhullámú sávban, kb. 200 MHz-nél van a felső határa a klasszikus, kompenzációs elven működő mérőhidak alkalmazhatóságának, mivel ebben a tartományban a minta méretei elhanyagolhatók a hullámhosszhoz képest, tehát a térerő homogénnek tekinthető az anyagban. 200 MHz fölött (URH és mikrohullámú sáv) a cella összemérhető, sőt nagyobb, mint a hullámhossz, ami inhomogén teret eredményez a mintában, továbbá a hídlemek első rezonanciái, valamint az etalonok nem elhanyagolható szórt elemei is mérésre alkalmatlanná teszik a hidas módszert. Ebben a tartományban az áthaladó URH, ill. mikrohullám teljesítménycsökkenését mérjük és a csillapítási tényezőből következtetünk a komplex permittivitásra, amire nincsen elfogadott, kidolgozott eljárás. Híradástechnikai célokra gyártott hálózatanalizátort kell átalakítani impedanciameghatározásra.

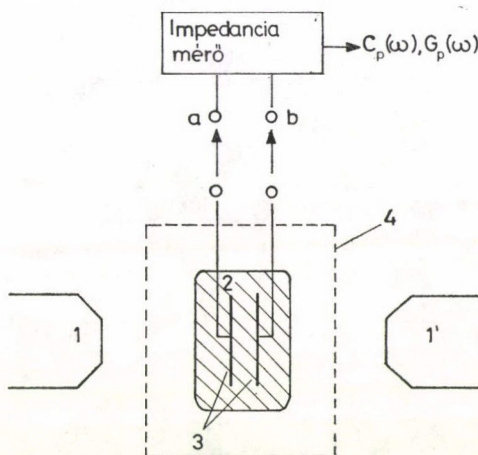
A két, egymástól elvileg különböző mérési módszer természetesen más cellakonstrukciót igényelt. A cellák felépítése rádiótechnikai szempontból különbözött, alacsony frekvencián kétpólust használtunk, URH-n és mikrohullámon pedig a hullámvezető tápvonal belsejében helyeztük el a mintát. A mintatartókat mindkét esetben speciálisan folyadékkristály anyagok vizsgálatára terveztük, ami a következő követelmények kielégítését jelentette:

- a minta orientálhatóságának biztosítása,
- minimális anyagszükséglet,
- a hőmérséklet széles tartományban való változtatása,
- a minta cseréjének biztosítása, tisztíthatóság.

IV.3a Impedanciamérés kis frekvenciákon

A kísérleti elrendezést sematikusan a 6. ábrán mutatjuk be. A folyadékkristályt egy zárható üvegampullában helyeztük el, amelybe két párhuzamos wolframlemez-elektroda merült.

A minta hőmérsékletét $0,1\text{ }^{\circ}\text{C}$ -ra stabilizált víz vagy olajfürdő biztosította. A direktor irányát mágneses tér tüntette ki. Mivel a mintatartó a függőleges tengely körül forgatható volt, így a rendező mágneses és a mérő elektromos tér iránya közötti szöget változtatni lehetett. $\mathbf{B} \parallel \mathbf{E}$ esetén párhuzamos, $\mathbf{B} \perp \mathbf{E}$ szituációban merőleges orientációt mértünk.

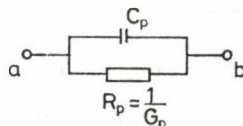


6. ábra. Mérési elrendezés kis frekvencián, 1 — elektromágnes, 2 — folyadékkristály anyag, 3 — elektródák, 4 — termosztálás

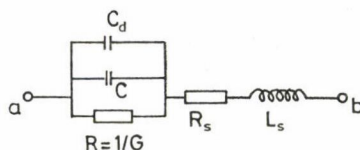
Az impedanciát kompenzációs elven működő hidakkal határoztuk meg a következő frekvenciatartományokban:

Frekvenciatartomány	Híd típusa	Pontosság	
		C	G
50 Hz—100 kHz	General Radio — 1615A	$\pm 0,01$	± 1
100 kHz—10 MHz	Wayne Kerr — B602	± 2	± 3
1 MHz—250 MHz	Hewlett Packard — 250B	± 2	± 4

Mindhárom mérőhíd párhuzamos RC körként kezeli a bemenetére (a és b pontok) csatlakoztatott bármely kétpólust, és a kimeneteken leolvashatók a C_p és $G_p = 1/R_p$ értékek:



A síkkondenzátoron kívül kivezetéseket, csatlakozókat is magában foglaló cella azonban nem tekinthető ideális RC körnek. Az eltérést nemkívánt összetevők: pl. veszteségek, szórt elemek okozzák, amelyek jelenléte nem szüntethető meg, de hatásvukorrekciók segítségével csökkenthetjük. A [23]-ban megadott módszert követjük, a reális mérőcellát a következő ekvivalens áramkörrel helyettesítettük:



C és R — az anyaggal töltött cella kapacitása és ellenállása, C_d — kábelek járulékos kapacitása, R_s — vezetékek ohmos ellenállása, L_s — járulékos induktivitás

C és G értékét a mért C_p -n és G_p -n keresztül kifejezhetjük.

$$C = \frac{A}{B^2 + \omega^2 A^2} - C_d; \quad G = \frac{B}{B^2 + \omega^2 A^2},$$

ahol

$$A = \frac{C_p}{G_p^2 + \omega^2 C_p^2} + L_s; \quad B = \frac{G_p}{G_p^2 + \omega^2 C_p^2} - R_s.$$

A dielektromos állandó reális és képzetes része:

$$\varepsilon'(\omega) = \frac{C(\omega)}{C_0} \quad \text{és} \quad \varepsilon''(\omega) = \frac{G(\omega)}{C_0 \omega},$$

ahol C_0 a cella geometriai kapacitása. A fenti kifejezésekben C_d , C_0 , L_s és R_s az adott mérőcella paraméterei, amelyeket kromatográfiai tisztaságú, tabulált dielektromos állandóval rendelkező folyadékokkal történt kalibrálással határoztunk meg úgy, hogy a frekvencia függvényében mért C_p és G_p adatokra a fenti kifejezéseket illesztettük. A paraméterek enyhén hőmérsékletfüggőek, nagyságrendjük a következő volt:

$$C_0 = 1 \text{ pF}, \quad C_d = 0,5 \text{ pF}, \quad L_s = 1 \text{ } \mu\text{H}, \quad R_s = 0,1 \text{ Ohm}.$$

A nagy számú folyadékkristály-minta sztatikus permittivitásának és vezetőképességének mérésére automatikus mérésösszeállítást használtunk. A mintáról kapott jelet fázisérzékeny erősítővel mértük és szétválasztottuk az impedancia kapacitív, illetve ohmos tagjával arányos részekre. Ezek az U_c , illetve U_Ω feszültsé-

gek vezérelték az $X-Y_1Y_2$ író Y_1 és Y_2 csatornáit, az X -re pedig — erősítés után — a termofeszültséget kapcsoltuk. Így folytonos $C_p(T)$ és $G_p(T)$ görbékert kaptunk.

A dielektromos diszperzió vizsgálatát úgy végeztük el, hogy a minta hőmérsékletét stabilizáltuk és a frekvenciát változtattuk, így berendezéseink adottságait optimalisan kihasználtuk. A mért $C_p(\omega)$ és $G_p(\omega)$ adatokat a fenti módon korrigálva, kiszámoltuk $\varepsilon'(\omega)$ -t és $\varepsilon''(\omega)$ -t minden hőmérsékletre. Az $\varepsilon^*(\omega)$ adatokra Debye, illetve Cole—Cole görbéket illesztettünk számítógép segítségével, aminek eredményeként megkaptuk a diszperzió paramétereit:

a növekményt: $[\varepsilon(0) - \varepsilon(\infty)]$

és a kritikus frekvenciát: $f_c = 1/2\pi\tau$.

IV.3b Impedanciamérés URH és mikrohullámú tartományban

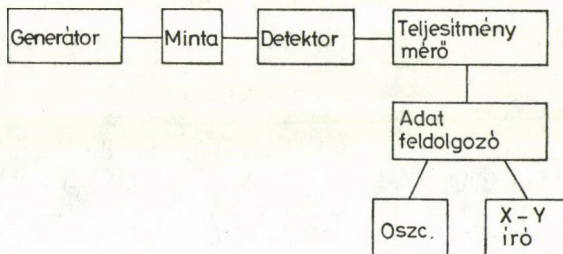
A 10 MHz—18 GHz sávban frekvencia-sweeperrel és digitális adatfeldolgozóval ellátott hálózatanalizátort használtunk. A konvencionális mikrohullámú spektroszkópiának ez volt az első alkalmazása folyadékok [24], [25], majd folyadékkristályok [B4], [B5] impedanciájának meghatározására. A módszer a cella komplex átviteli jellemzőinek mérésén alapult: $\gamma^*(\omega) = \alpha(\omega) + i\beta(\omega)$, $\alpha(\omega)$ — csillapítási koefficiens, $\beta(\omega)$ — fázis koefficiens.

$\gamma^*(\omega)$ és $\varepsilon^*(\omega)$ kapcsolata a következő:

$$\gamma^*(\omega) = i\omega \frac{\varepsilon^*(\omega)^{1/2}}{c},$$

ahol c — fénysebesség, α és β mérése lehetővé teszi ε' és ε'' meghatározását.

A berendezés blokkvázlata a 7. ábrán látható.



7. ábra. Nagyfrekvenciás mérési elrendezés blokkvázlata

A mintát egy koaxiális tápvonal belsejében helyeztük el teflon ablakok között, amelyeket 10—15°-ban megdöntve rögzítettünk, a felületekről való visszaverődések kiküszöbölése céljából.

A csillapítás (α) mérésekor az adó és a detektor között elegendő csak a mintát magában foglaló megfelelő méretű tápvonaldarabot elhelyezni, mert α közvetlenül kiszámítható a bemenő és átvitt teljesítmény arányának logaritmusából.

A fázis (β) meghatározásánál az adó és a detektor között hídkapcsolásban helyeztük el a mintát. A híd egyik ágában a cella, a másik — referencia gban —

azonos méretű, üres tápvonal helyezkedett el. A minta véges átviteli jellemzői fáziskülönbséget eredményeztek a két ágra szétcsatolt mikrohullám között, amit frekvencia függvényében detektáltunk.

A módszer eredeti [25], nagyobb pontosságú és gyorsabb, mint az ezt megelőzően alkalmazott, Fourier transzformálást is igénylő time-domain spektroszkópia.

18 GHz fölött még két rögzített frekvencián: 36 GHz-en és 72 GHz-en végeztünk méréseket. $\varepsilon^*(\omega)$ meghatározásának elve megegyezett a frekvencia-sweeperrel ellátott hálózatanalizátornál alkalmazottal, de a kivitelezés módja lényegesen különbözött. Két független berendezést használtunk, csak az adott frekvenciára hangolható adóval, detektorral és a hullámhossznak megfelelő keresztmetszetű négyszögletes, merev csőtápvonalakkal.

V. SZTATIKUS PERMITTIVITÁS ÉS VEZETŐKÉPESSÉG

A *sztatikus permittivitás* $\varepsilon(0)$ mérése hőmérséklet függvényében az alaphelyzet felvételét, a dinamikai vizsgálatok kiindulópontját jelenti, ugyanakkor információt ad szerkezetváltozásokról is a fázisátmenetek közelében.

Hengerszimmetrikus rendszerekben az $\varepsilon(0)$ tenzor három diagonális eleme közül kettő egybeesik:

$$\varepsilon(0) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp}(0) & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\perp}(0) & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\parallel}(0) \end{pmatrix},$$

ahol $\varepsilon_{\parallel}(0)$ — a direktorral párhuzamosan, $\varepsilon_{\perp}(0)$ — a direktorra merőlegesen mért permittivitás.

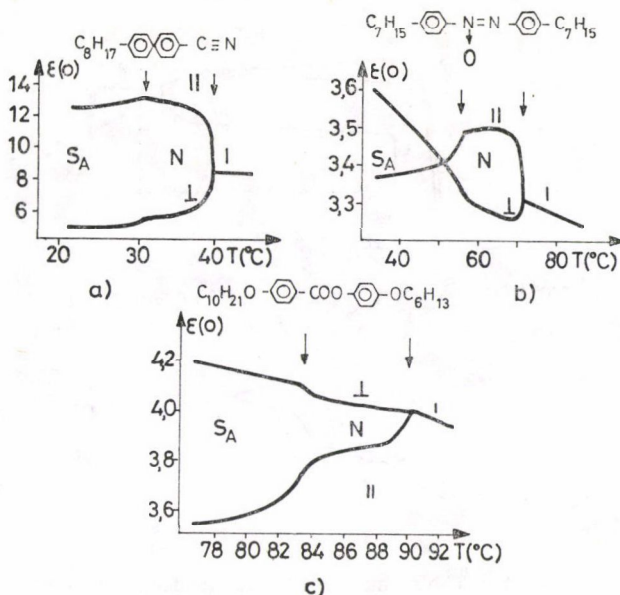
Egyéb vizsgálatok, pl. az általunk is tanulmányozott Frederiksz-átmenetek [27], [29], viszkozitás és rugalmas állandó mérések [28], elektromos térrel indukált instabilitások [26] és a gyakorlati alkalmazás szempontjából is fontos mennyiség az anizotrópia:

$$\varepsilon_a = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}.$$

Az ε_a előjelét és abszolút értékét a molekula permanens dipólmomentumának nagysága, annak a molekulatengellyel bezárt szöge, valamint a folyadékkristály rendezettségi foka határozza meg. Utóbbi indokolja ε_a hőmérsékletfüggését.

Meghatároztuk a dielektromos tenzor elemeit és azok hőmérsékletfüggését a II. táblázatban felsorolt anyagok valamennyi fázisában. A 8—10. ábrákon példákkal szemléltetjük $\varepsilon(0)$ hőmérsékletfüggésének jellegzetességeit. A bemutatott kísérleti görbék reprodukálhatósága a vonalvastagsággal összemérhető, a felvételek — az előzőekben leírt — folytonos üzemmódban készültek.

A 8. ábrán N és S_A fázissal rendelkező anyagok közül mutatunk be három példát, amelyeken szemléltetjük a permittivitás értékeinek és azok hőmérsékletfüggésének sokféleségét. Izotróp fázisban $\varepsilon(0)$ követi az $1/T$ törvényt, és a vizsgált rövid hőmérséklettartományban lineárisnak tekinthető. Hűtéskor $T = T_{NI}$ -nél megjelenik a folyadékkristály fázis, vele az orientációs rend és az anizotrópia. Az a) esetben ε_a nagy és pozitív az N tartományban, értékét és előjelét S_A -ban is megőrzi. A b) ábrán bemutatott anyag N fázisában ε_a pozitív, de kicsi és S_A -ban előjelet vált.



8. ábra. Folyadékkristályok sztatikus dielektromos permittivitásának hőmérsékletfüggése. A függőleges nyilak a fázisátmeneteket jelzik

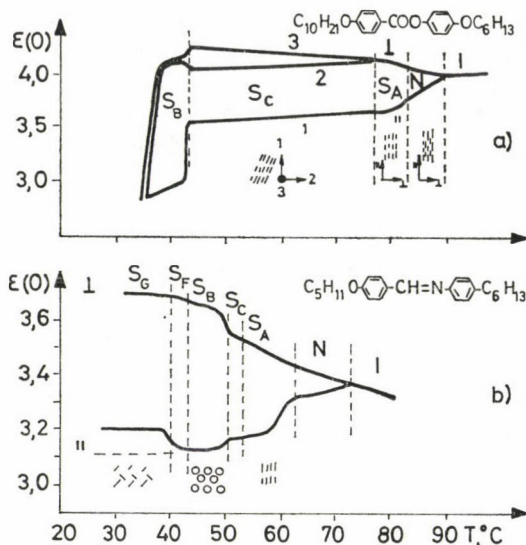
A c) esetben ϵ_a negatív és hűtéskor értéke tovább csökken. A 8. ábrából az a következtetés vonható le, hogy N és S_A fázis kialakulásában nem játszik szerepet a molekula permanens dipólmomentumának nagysága és iránya. ϵ_a előjele tetszőleges; abszolút értéke pedig széles határok között változik [B7], [B2].

Az S_A -nál alacsonyabb hőmérsékletű, tehát rendezettebb S fázisokban elsőként mi végeztünk dielektromos vizsgálatokat, amelyeket kiterjesztettünk valamennyi eddig definiált (és beszerezhető) S szerkezetre. Tapasztalataink szerint az ilyen „hideg” S fázisokkal is rendelkező anyagok dielektromos anizotrópiája kicsi és általában negatív. A leggyakrabban megvalósuló fázisszekvenciákra pedig az jellemző, hogy merőleges és dőlt fázisok váltakoznak, erre a 9. ábrán mutatunk be két példát. Mindkét anyagra $\epsilon_a < 0$, értéke néhány tized, és hűtéskor a rendezettség növekedésével csökken [B3], [B12].

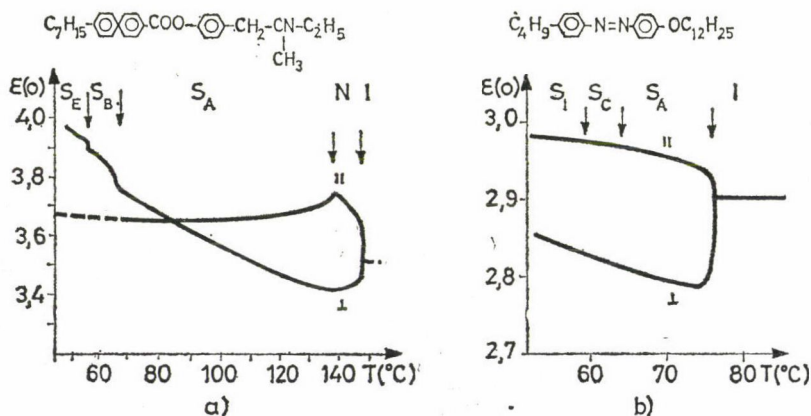
A 10. ábrán bemutatott anyagok különlegessége, hogy az a) esetben csak ortogonális: $N-S_A-S_B-S_E$ [B14], a b)-ben dőlt szerkezetek: S_C-S_I [B16] követik egymást, ami alkalmassá tette számunkra ezeket a vegyületeket arra, hogy rajtuk további, részletes vizsgálatokat végezzünk. A váltakozó szerkezetek ugyanis kontrollálhatatlanná teszik a minta rendezettségét, ha egy dőlt fázist egy hidegebb merőleges követ, akkor nem állítható elő megbízható S egykristály.

Térjünk vissza a 9a ábrán bemutatott anyagra, aminek igen széles hőmérséklet-intervallumban van S_C fázisa, ezért különösen alkalmasnak bizonyult arra, hogy tanulmányozzuk rajta a dőlt szerkezet sajátosságait.

Elsőként dolgoztunk ki módszert a dielektromos tenzor elemeinek kísérleti meghatározására kéttengelyű rendszeren és következtettünk a direktor dőlésszögének



9. ábra. Több szmektikus fázissal rendelkező két vegyület sztatikus dielektromos permittivitásának hőmérsékletfüggése



10. ábra. Merőleges és dőlt szerkezetű szmektikus folyadékkristályok dielektromos permittivitása

értékére és hőmérsékletfüggésére [B3], [B8]. Eljárásunk lényegét a következőkben ismertetjük.

Tekintettel arra, hogy S_C -ben a direktor iránya nem esik egybe az S rétegek normálisával, hanem Ω szöget zár be vele, ami ráadásul függ a hőmérséklettől, ezért ϵ_{\parallel} és ϵ_{\perp} mérése nem végezhető el az ortogonális szerkezetek esetében alkalmazott egyszerű módon, ahol a mérő elektromos és a rendező mágneses tér irányát párhuzamosra, illetve egymásra merőlegesre választva a permittivitás két komponense

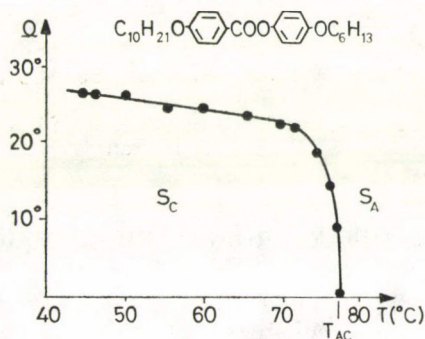
közvetlenül mérhető. Így S_C -ben ε_{\parallel} -t és ε_{\perp} -t közvetve határoztuk meg. Mértük a permittivitást három, egymásra merőleges irányban: 1 — a rétegek síkjára merőlegesen (ε_1), 2 — a c direktorral párhuzamosan (ε_2), 3 — n és c síkjára merőlegesen (ε_3) (9a ábra).

S_C egykristály készítésekor kihasználtuk a fázis azon tulajdonságát, hogy noha benne a c direktor iránya csak lokálisan kitüntetett, de külső mágneses térrel az egész mintában rendezhető. A mintakészítés során tehát két, egymásra merőleges irányban alkalmaztunk mágneses teret, először az ortogonális N , ill. S_A -ban n irányának kitüntetésére, majd S_C -ben erre merőlegesen, c irányának kiválasztása céljából. Az így mért ε_1 , ε_2 és ε_3 adatok a 9a ábrán láthatók. S_A -ból hűtve a rendszert $T = T_{AC}$ alatt a dőlésszög folyamatosan nő, ε_2 és ε_3 értéke eltávolodik egymástól.

Az 1, 2 és 3 irányban mért permittivitásokból következtettünk a dőlésszög nagyságára és hőmérsékletfüggésére. Az n -nel párhuzamos irányban mérhető értéket ε_{\parallel} -vel jelöltük és feltételeztük, hogy n -re merőleges síkban a permittivitás irányfüggetlen és ε_{\perp} -vel jelölhető. Ebben az esetben [B3]:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{\perp} &= \varepsilon_3, \\ \varepsilon_{\parallel} &= \varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_3, \\ \sin^2 \Omega &= \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2}{2\varepsilon_3 - \varepsilon_2 - \varepsilon_1}.\end{aligned}\quad (11)$$

A dőlésszög kiszámításának menete az I. Függelékben található. A (11) szerint meghatározott dőlésszög hőmérsékletfüggése a 11. ábrán látható, a görbe menete és Ω maximális értéke hasonló ahhoz, amit más vegyületekben optikai módszerrel mértek [30].



11. ábra. A direktor-dőlésszög hőmérsékletfüggése DOBHOP S_C fázisában

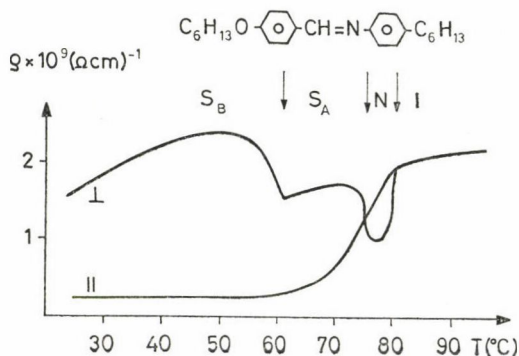
A 8—10. ábrák alapján elmondhatjuk, hogy a dielektromos tenzor komponenseinek viselkedése nem egységes a különböző S fázisokban, de az anizotrópia hőmérsékletfüggését továbbra is főként az orientációs távoli rend változása vezérli. A sztatikus adatok kvantitatív tárgyalása nem választható el a dinamikai vizsgálatoktól, hiszen $\varepsilon(0)$ -nek jelentős járuléka származik a dipólorientációból, amelyet

a diszperzió mérésekor el tudunk különíteni. Ezért a sztatikus és dinamikus adatok részletes elemzését együtt végezzük el a későbbi fejezetekben.

N folyadékkristályok egyenáramú vezetőképessége $\varrho = (10^{-9} - 10^{-11}) (\Omega\text{cm})^{-1}$ határok között mozog és az anyagtisztaság függvénye. Mérése a rendszerbe szándékosan bevitt vagy az előállítás során véletlenül bekerült töltött szennyezések jelenlétében lehetséges. Az anizotrópia $\varrho_a = \varrho_{\parallel} - \varrho_{\perp}$ nullához közeli pozitív érték.

S fázisokban $\varrho_a < 0$, tehát $N-S$ fázisátmenet közelében előjelet vált. A 12. ábrán példát mutatunk be I , N , S_A , S_B fázisok vezetőképességének hőmérsékletfüggésére. Hűtésekor ϱ_{\parallel} folyamatosan csökken, majd S_B fázisban telítődik. A telítési érték kapcsolatban áll a molekuláris rendezettség mértékével. ϱ_{\perp} viselkedése meglepőbb, hűtésekor N fázisban csökken, majd $N-S_A$ és S_A-S_B átmeneteken ugrás-szerűen nő. Az S_B struktúra erősen favorizálja a rétegekkel párhuzamos töltésmozgást. Ez a megállapítás összhangban van egyéb transzport paraméterek viselkedésével [31].

Mivel ϱ értéke nem a folyadékkristály anyagra, hanem sokkal inkább a benne levő szennyezésekre jellemző, ezért a kísérleti meghatározáson túl nem foglalkoztunk a probléma részleteivel.



12. ábra. A vezetőképesség hőmérsékletfüggése különböző fázisokban

VI. DIELEKTROMOS DISZPERZIÓ

A dielektromos diszperzió tanulmányozása a komplex permittivitás frekvenciafüggésének mérését jelenti a rádiófrekvenciás tartományban, amit elvégeztünk a vizsgált anyagok valamennyi fázisában.

VI.1. Izotróp folyadékfázis

Izotróp folyadékállapotban a folyadékkristályos anyag nem különbözik egyéb poláros folyadékoktól, így a dielektromos viselkedésben nem volt okunk feltételezni eltérő jelenségeket. A dielektromos diszperzió vizsgálata azért fontos ebben a fázisban, mert:

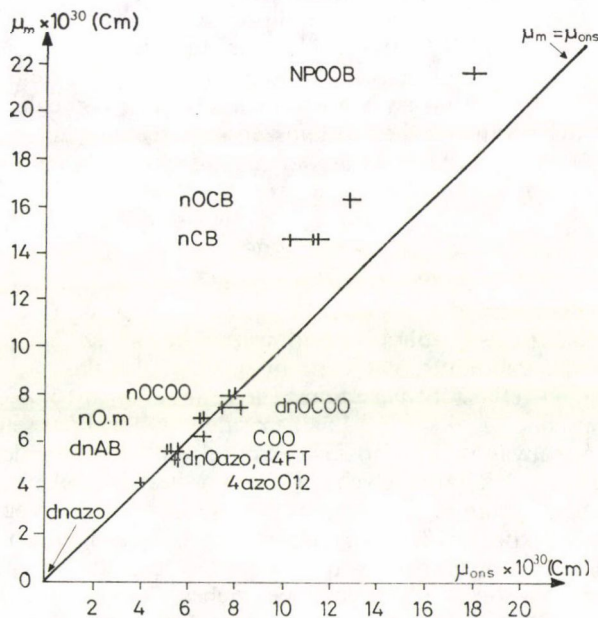
— a relaxációs idő és intenzitás ismerete szükséges a folyadékkristály állapotban tapasztalt viselkedés értelmezéséhez,

— a dielektromos növekményből a molekuláris dipólmomentum abszolút értékére lehet következtetni,

— vizsgálni lehet az Onsager-elmélet alkalmazhatóságát rúd alakú (nem gömb-szimmetrikus) részecskékből álló, kondenzált dielektrikum esetére.

A kísérletek során egy dipólrelaxációs folyamatot találtunk a 10^8 – 10^9 Hz tartományban. A diszperziós görbék nagyfrekvenciás oldala ugyan általában elnyújtott volt, de még jó közelítéssel tárgyalhattuk a Debye formalizmussal (lásd. 14a. ábra).

Elvégeztük a kiértékelést annak érdekében, hogy a mért anyagi (kontinuum) paraméterekből molekuláris jellemzőkre következtessünk. A diszperzió mérése során kapott dielektromos növekményt: $[\varepsilon(0) - \varepsilon(\infty)]$ -t használtuk fel arra, hogy a molekula permanens dipólmomentumát meghatározzuk. Erre a célra az Onsager-egyenletet (7) alkalmaztuk, ahol $\varepsilon(0)$ és $\varepsilon(\infty)$ helyére a $T = T_{NI}$ hőmérsékleten izotróp fázisban mért adatokat helyettesítettünk, a sűrűséget 10^3 kg/m^3 -nek vettük. A kapott eredményt (μ_{ons}) a 13. ábra vízszintes tengelyére mértük fel, a függőleges tengelyen az egyedi molekula dipólmomentumát (μ_m) adtuk meg.



13. ábra. μ_{ons} és μ_m kapcsolata folyadékkristályok izotróp állapotában

μ_m értéke megbízhatónak tekinthető olyan anyagoknál, amelyek híg oldataiban közvetlenül mérték a molekuláris dipólmomentumot, pl.: NPOOB [32], vagy olyan esetben, amikor a molekula teljes dipólmomentumát egyetlen, jól definiált nagyságú és helyzetű poláros csoport határozza meg. pl.: CN csoport az alkilciano bifenilekben, COO a dialkil észterekben vagy NON a dialkil azoxi családnál. μ_m bizonytalan-

sága nagyobb olyan esetekben, amikor az eredő momentum több poláros csoport hatásának összegeként alakul ki és nem áll rendelkezésre közvetlen mérés. Ilyen anyagoknál μ_m -et a részmomentumok vektoriális összegeként adtuk meg. Pl.: nOCB esetén:

$$\mu_m(\text{nOCB}) = \mu(\text{nCB}) + \mu(\text{n0}) = \{(14,7 \times 10^{-30} + 4,3 \times 10^{-30} \cos 72^\circ)^2 + (4,3 \times 10^{-30} \sin 72^\circ)^2\}^{1/2} \text{ Cm} = 16,3 \times 10^{-30} \text{ Cm}.$$

A 13. ábrán vastag vonallal jelölt egyenes $\mu_m = \mu_{\text{ons}}$ -nek felel meg. A vizsgált vegyületek két csoportba oszthatók. Egyikbe a gyengén poláros ($\mu_m < 10^{-29}$ Cm) molekulák sorolhatók. μ_m bizonytalanságát és μ_{ons} mérési hibáját figyelembe véve az Onsager-egyenlet rájuk jó közelítéssel alkalmazható, a pontok $\mu_m = \mu_{\text{ons}}$ közelében vannak. Egyéb, nem folyadékkristályos szerves izotróp folyadékok esetén hasonló eredményre lehet jutni, az eltérés általában 10–15% [10]. Levonhatjuk azt a következtetést, hogy az Onsager-formula, amely gömbszimmetrikus részecskékkal számol, alkalmazható az erősen elnyúlt folyadékkristály molekulákra is. Eltérést tehát nem az alak-anizotrópia okoz.

Az adatok a második csoportba sorolható anyagoknál térnek el a $\mu_m = \mu_{\text{ons}}$ egyenestől. Ezek a molekulák méret, molekulasúly, alak szempontjából nem különböznek az előzőektől, számottevő eltérés a dipólmomentum nagyságában és helyzetében van. A nCB, nOCB és NPOOB vegyületek mindegyike erős ($\mu_m > 14 \times 10^{-30}$ Cm), terminális, tengely irányú dipólmomentummal rendelkezik. Az eltérést úgy magyaráztuk, hogy figyelembe vettük az izotróp folyadékokban is meglevő rövidtávú rendet, ami korrelációt eredményezhet a szomszédos részecskék, illetve dipólmomentumok orientációjában. A kölcsönhatásokat elhanyagoló Onsager-egyenlet helyett a Kirkwood és Fröhlich által módosított változatot alkalmazva [33]:

$$\mu_{\text{ons}}^2 = \mu_m^2 g,$$

ahol $g = 1 + z \langle \cos \gamma \rangle$ — a dipólkorrelációs tényező,

z — a közeli szomszédok száma,

γ — két szomszédos dipólmomentum iránya közötti szög.

$g \neq 1$ akkor, ha van kapcsolat a szomszédos molekulák orientációja között. Ha a közeli rend következtében a szomszédos dipólmomentumok egymással párhuzamosan orientálódnak, akkor $g > 1$; antiparalel dipólbeállítás esetén $g < 1$.

Ha a vizsgált anyagok izotróp fázisában olyan közeli rendet tételezünk fel, amely a szomszédos molekulatengelyek párhuzamos beállását jelenti, ami kézenfekvő, mert ez alakul távoli renddé az alacsonyabb hőmérsékleten megjelenő folyadékkristály fázisban, akkor a 13. ábra adatait a következőképpen értelmezhetjük:

— a közeli rend nem von maga után korrelációt a dipolorientációban ($g \approx 1$), ha a dipólmomentum kicsi, a molekula belsejében (közepén) lokalizált és szöget zár be a hossz tengellyel;

— ha a dipólmomentum nagy, terminális és tengelyirányú, akkor a közeli rend antiparalel dipolorientációt eredményez: $g < 1$ már izotróp állapotban is. A 13. ábráról leolvasható értékek a következők:

	nOCB	nCB	NPOOB
g	$0,61 \pm 0,05$	$0,55 \pm 0,05$	$0,68 \pm 0,05$

Összegezve az izotróp folyadékállapotban mért dielektromos adatokat, a következőket állapítottuk meg:

1. Debye-típusú dipólrelaxáció mérhető.
2. A dielektromos növekményből μ_m jó közelítéssel kiszámítható a Kirkwood—Fröhlich-formulával, az alakanizotrópia nem játszik szerepet.
3. Gyengén poláros vegyületeknél a dipól—dipól kölcsönhatás elhanyagolható.
4. Erősen végpoláros anyagoknál antiferroelektromos lokális elrendeződés valószínű.
5. μ_m -nek a molekulatengellyel párhuzamos (μ_l) és arra merőleges (μ_q) vetületeiről nem ad információt az izotróp folyadékban végzett mérés. μ_l és μ_q viselkedésére a folyadékkristály fázis dielektromos diszperziójából következtethetünk.

VI.2. Folyadékkristály fázis

Az előző fejezetben bemutatott kísérleti adatok szemléltetik (8—10. ábrák) a sztatikus külső térben mért dielektromos permittivitás sokféleségét, az anizotrópia értékének, előjelének és hőmérsékletfüggésének változatosságát. Ugyanezen anyagok (és valamennyi egyéb, eddig vizsgált N és S folyadékkristály) dinamikus viselkedése hasonló egymáshoz. Az általánosítható, közös vonásokat a 14. ábrán MBBA diszperziós görbéin mutatjuk be [B5], [B7].

Párhuzamos orientáció esetén (14b ábra) két, egymástól jól elkülönülő folyamat figyelhető meg, az alacsonyfrekvenciás $\parallel - 1$ és a nagyfrekvenciás $\parallel - 2$ diszperzió. A $\parallel - 1$ folyamat teljesen vagy közel Debye-típusú, egyetlen relaxációs idővel $\tau_{\parallel - 1}$ jellemezhető, A $\parallel - 2$ Cole—Cole jellegű, két vagy több, egymáshoz közeli, tehát nem szeparálható relaxációs folyamat szuperpozíciója. A relaxációs idők tipikus értékei N rendszerekben:

$$\tau_{\parallel - 1} = \frac{1}{2\pi f_c(\parallel - 1)} = (10^{-8} - 10^{-6})s,$$

$$\tau_{\parallel - 2} = \frac{1}{2\pi f_c(\parallel - 2)} = (10^{-11} - 10^{-9})s.$$

Merőleges orientációnál (14c ábra) egy diszperzió mérhető, amely Cole—Cole típusú, a hozzá tartozó relaxációs idő:

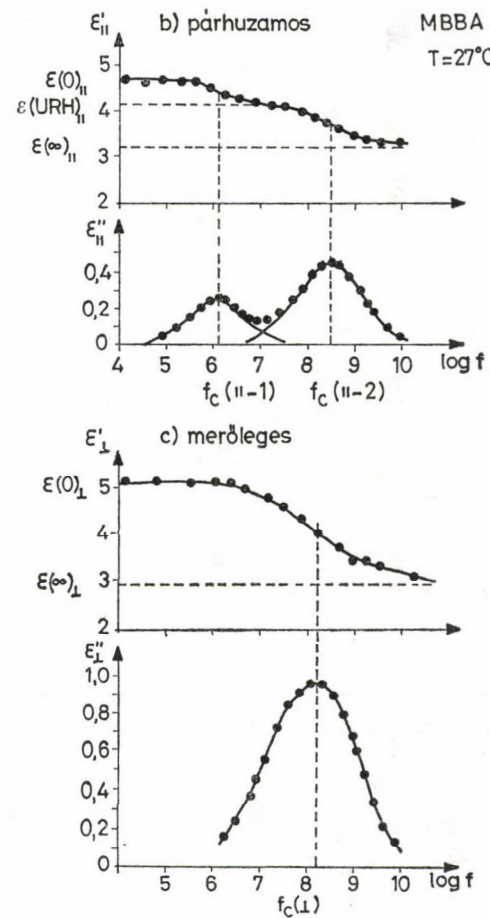
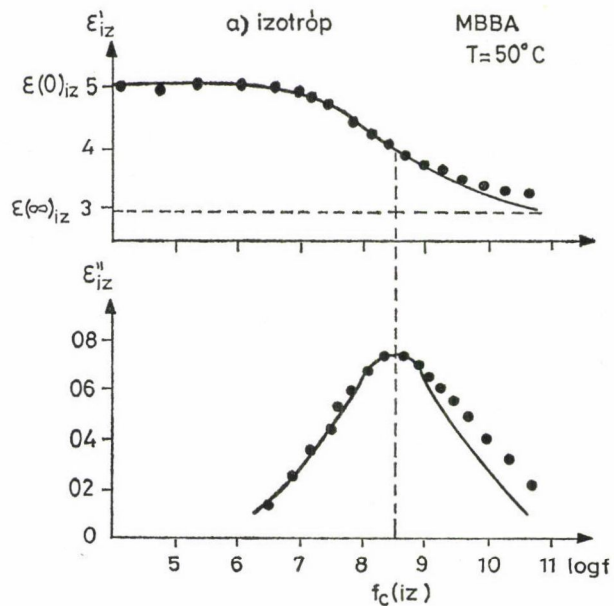
$$\tau_{\perp} = \frac{1}{2\pi f_c(\perp)} \cong 10^{-10}s.$$

$\tau_{\parallel - 2}$ és τ_{\perp} egymáshoz közeli értékek.

A három folyamat intenzitása és azok egymás közötti aránya a dipólmomentum nagyságától és a tengellyel bezárt szögétől függ. A kapcsolat kvalitatív elemzése a dolgozat következő fejezeteinek fő feladata.

Célunk, hogy a 14. ábrán bemutatott viselkedést magyarázzuk, a három diszperziós tartományhoz relaxációs folyamatokat rendeljünk.

Az irodalomban közzétett, csak kevés, speciális felépítésű molekulatípuson végzett méréseken alapuló interpretáció [20] nem állta meg a helyét általános esetben.



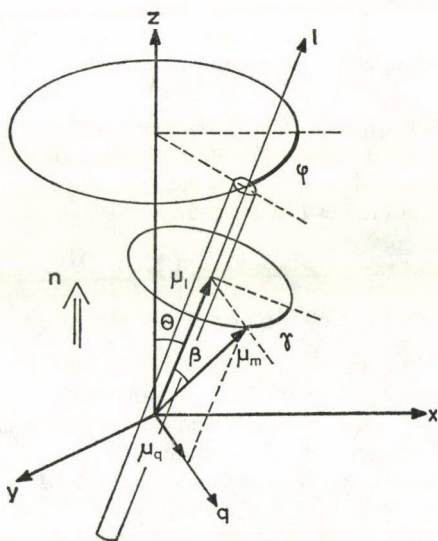
14. ábra. MBBA dipólrelaxációs folyamatai

Kísérleteinkben [B2], [B4], [B6], [B9] megállapítottuk, hogy mindhárom relaxáció jelen van olyan anyagoknál is, amelyeknek egyetlen, tengelyirányú, a molekulatörzshöz mereven csatlakozó dipólmomentuma van. Ebben az esetben a $\parallel -1$ diszperzió továbbra is értelmezhető a molekula rövid tengelye körüli átfordulásával, de a $\parallel -2$ megjelenése nem magyarázható poláros láncok intramolekuláris mozgásával és a \perp diszperzió sem eredhet kizárólag hossztengety körüli forgásból. Modellt javasoltunk, amely magyarázza a dielektromos viselkedést a fenti speciális esetben, ugyanakkor általános helyzetű dipólmomentum esetén is alkalmazható.

VI.2a A javasolt modell

Feltételeztük, hogy a molekula dipólmomentuma μ_m a törzshöz mereven kapcsolódik, nagyságát és a tengellyel bezárt szögét a molekulaszervezet határozza meg. Két vagy több poláros rész esetén μ_m szerepét az eredő momentum játssza. A feltételezés következménye, hogy a dipólrelaxáció csak az egész molekula elfordulásával képzelhető el. Megvizsgáltuk a lehetséges molekulamozgásokat, amelyek hozzájárulnak az orientációs polarizáció kialakulásához. Ezek a következők (l. 15. ábra):

1. Θ — forgás: a direktor és a molekulatengely közötti szög (Θ) változik; a molekula elfordul a rövid tengelye körül. Ennek szélsőséges esete a teljes átfordulás, amikor $\Theta \rightarrow (\pi - \Theta)$ -ra változik;



x, y, z — laboratóriumi koordináta rendszer,
 z párhuzamos a direktorral

l, q — molekulához rögzített koordináta-rendszer,
 l párhuzamos a molekula hossztengetyével

15. ábra. A folyadékkristályos rendszerben lehetséges molekulaforgások modellje

2. φ — forgás: adott Θ szögnél a molekulatengely elfordul a direktor körül;
3. γ — forgás: a molekula forog a saját hossz tengelye körül.

Célunk volt ezen forgásoknak a polarizációra, illetve a dielektromos szuszceptibilitásra gyakorolt hatásának leírása, amit Kubo lineáris válaszmélete alapján végeztünk. Vizsgáltuk a rendszer válaszát z és x irányú külső elektromos terekre, előbbi a párhuzamos, utóbbi a merőleges orientációnak felelt meg. Indukált momentumok szerepével nem foglalkoztunk.

Felírtuk a (10)-ben megadott dipólkorrelációs függvényeket N dipólt tartalmazó egységnyi térfogatú anyagra. Figyelembe véve, hogy csak irányfluktuációk (forgások) hatását kerestük, ezért a korrelációs függvények az elektromos tér és a dipólmomentum szögének korrelációját tartalmazták, a momentum nagysága $\mu_m = \text{const}$. A keresztkorrelációkat elhanyagolva kaptuk:

$$F_{\parallel}(t) = N\mu_m^2 \langle \cos \psi(t), \cos \psi(0) \rangle, \quad (12)$$

ahol ψ — z és μ_m közötti szög,

$$\begin{aligned} \cos \psi &= \cos \Theta \cos \beta - \sin \Theta \sin \beta \cos \gamma; \\ F_{\perp}(t) &= N\mu_m^2 \langle \cos \phi(t), \cos \phi(0) \rangle, \end{aligned} \quad (13)$$

ahol ϕ — x és μ_m közötti szög,

$$\cos \phi = \sin \Theta \cos \beta \cos \varphi + \cos \Theta \sin \beta \cos \varphi \cos \gamma - \sin \varphi \sin \gamma \sin \beta.$$

VI.2b Molekulatengellyel párhuzamos dipólmomentum esete

Legyen $\beta=0$, tehát $\mu_m = \mu_l$ [B15]. Ebben az esetben a molekuladinamika leírásánál a γ -mozgást figyelmen kívül hagyhatjuk, mert a hossz tengely — jelen esetben a momentum — körüli forgás nem befolyásolja a polarizációt.

$F_{\parallel}(t)$ és $F_{\perp}(t)$ alakja (12) és (13) alapján:

$$\begin{aligned} F_{\parallel}(t) &= N\mu_m^2 \langle \cos \Theta(t), \cos \Theta(0) \rangle, \\ F_{\perp}(t) &= N\mu_m^2 \langle \sin \Theta(t) \cos \varphi(t), \sin \Theta(0) \cos \varphi(0) \rangle. \end{aligned}$$

Ahhoz, hogy a párhuzamos irányú korreláció elhaljon; az szükséges, hogy a molekulák felénél $\cos \Theta$ előjele megváltozzon, ami csak úgy valósulhat meg, hogy azok áthaladnak a $\Theta = \pi/2$ helyzeten. A nematikus potenciál: $U(\cos \Theta)$ maximális a $\Theta = \pi/2$ helyen, tehát ellenhat $F_{\parallel}(t)$ lecsengésének.

$F_{\perp}(t)$ lecsengéséhez elegendő $\cos \varphi$ előjelcseréje; amit $U(\cos \Theta)$ nem gátol, hanem ellenkezőleg, a $\sin \Theta$ csökkenését elősegítve, gyorsítja a folyamatot.

A molekulamozgásokat a következőképpen vettük figyelembe:

1. Összevontuk a Θ és φ szerinti forgást és szabad rotációs diffúzióként kezeltük a következő szögtartományokban:

$$\begin{aligned} \text{A) } 0 \leq \Theta \leq \Theta_0 \quad \text{és} \quad \text{B) } \pi - \Theta_0 \leq \Theta \leq \pi \\ 0 \leq \varphi \leq 2\pi \qquad \qquad \qquad 0 \leq \varphi \leq 2\pi. \end{aligned}$$

Θ_0 a folyadékkristály orientációs rendparaméterével összefüggésben levő határszög. A diffúziós állandót D -vel jelöltük.

2. Figyelembe vettük a rövid tengely körüli átfordulást, vagyis átmenetet az A és B tartomány között. Az átfordulás frekvenciáját Γ -vel jelöltük és a továbbiakban feltételeztük, hogy $\Gamma \ll D$.

A fenti módon megadott mozgást a következő egyenletekkel írtuk le:

$$\begin{aligned}\dot{C}_A &= D \triangle C_A - \Gamma(C_A - B_B), \\ \dot{C}_B &= D \triangle C_B + \Gamma(C_A - C_B).\end{aligned}\quad (14)$$

$C_A(\Theta, \varphi, t)$ és $C_B(\Theta, \varphi, t)$ dipólkonzentrációt jelent az A és B szögtartományokban. A $\nabla C_A(\Theta_0, \varphi) = \nabla C_B(\Theta_0, \varphi) = 0$ határfeltétel biztosítja a teljes dipólmennyiség megmaradását. Az orientációs dipóleloszlás-függvény kielégíti a (14) egyenleteket. A megoldás menete a II. Függelékben található.

A számolás végeredménye a következő

$$\varepsilon^*(\omega)_{\parallel} - \varepsilon(\infty)_{\parallel} = \frac{N\mu_m^2}{\varepsilon_0 k T} \left\{ \frac{\langle \cos \Theta \rangle_K}{1 + \frac{i\omega}{2\Gamma}} + \frac{\langle \cos \Theta \phi_{1,0}(\Theta) \rangle_K}{1 + \frac{i\omega}{DE_{1,0} + 2\Gamma}} \right\}, \quad (15a)$$

$$\varepsilon^*(\omega)_{\perp} - \varepsilon(\infty)_{\perp} = \frac{N\mu_m^2}{\varepsilon_0 k T} \sin \Theta_0 \frac{\langle \sin \Theta \phi_{0,1}(\Theta) \rangle_K}{1 + \frac{i\omega}{DE_{0,1}}}, \quad (15b)$$

ahol $\phi_{n,m}(\Theta)$ — sajátfüggvények, $E_{n,m}$ — sajátértékek és a K szerinti átlagolás jelentése:

$$\langle f(\Theta, \varphi) \rangle_K = \frac{\int_K d\Theta d\varphi \sin \Theta f(\Theta, \varphi)}{\int_K d\Theta d\varphi \sin \Theta},$$

ahol K az A és B szögtartományokat foglalja magában:

$$K = \{(\Theta, \varphi); 0 \leq \Theta \leq \Theta_0 \text{ és } 0 \leq \varphi \leq 2\pi\}$$

D , Γ és Θ_0 — paraméterek.

A (15a) és (15b) kifejezések *kvalitatív* módon leírják a kísérleti eredményeket. Párhuzamos orientációban két, merőlegesben egy Debye relaxációs folyamatot kapunk, a következő intenzitásokkal és relaxációs időkkal:

$$I_{\parallel -1} = \frac{N\mu_m^2}{\varepsilon_0 k T} \langle \cos \Theta \rangle_K; \quad \tau_{\parallel -1} = \frac{1}{2\Gamma},$$

$$I_{\parallel -2} = \frac{N\mu_m^2}{\varepsilon_0 k T} \langle \cos \Theta \phi_{0,1} \rangle_K; \quad \tau_{\parallel -2} = \frac{1}{DE_{1,0} + 2\Gamma},$$

$$I_{\perp} = \frac{N\mu_m^2}{\varepsilon_0 k T} \sin \Theta_0 \langle \sin \Theta \phi_{0,1} \rangle_K; \quad \tau_{\perp} = \frac{1}{DE_{0,1}}.$$

Kiemeljük, hogy a $\tau_{\parallel-1}$ -re kapott érték csak Γ -tól függ, tehát az alacsony-frekvenciás folyamatban csak a rövid tengely körüli átfordulás játszik szerepet. Mivel $I_{\parallel-2}$ és I_{\perp} -re nullától különböző értékeket kaptunk, tehát a modell magyarázza a nagyfrekvenciás diszperziók jelenlétét $\beta=0$ esetben is.

A számolás *kvantitatív* ellenőrzését úgy végeztük, hogy Θ_0 -t bemenő paraméternek választva 2° -os lépésekkel számoltunk $0 \leq \Theta_0 \leq 90^\circ$ tartományban. A számolás eredményét a III. táblázatban szemléltetjük 12° és 46° közötti intervallumban. A kísérleti összehasonlítást oktil ciano bifenil mérési adataival végeztük és a IV. táblázatban mutatjuk be. A 8CB nematikus tartományában kiválasztott mérési hőmérsékletekhez tartozó Θ_0 értékeket kétféleképpen határoztuk meg. $\Theta_0(1)$ -et az $I_{\perp}/I_{\parallel-1}$ arányból, $\Theta_0(2)$ -t pedig $I_{\parallel-1}/I_{\parallel-2}$ arányból.

III. TÁBLÁZAT

A számítógépes megoldás paraméterei

Θ_0	$I_{\parallel-1}(\Theta_0)$	$I_{\parallel-2}(\Theta_0)$	$I_{\perp}(\Theta_0)$	$E_{0,1}(\Theta_0)$	$E_{1,0}(\Theta_0)$	$S_{\Theta} = \frac{1}{2} \cos \Theta_0 (1 + \cos \Theta_0)$
46°	0,847	0,202	0,901	5,78	22,79	0,589
44°	0,860	0,186	0,838	6,25	24,91	0,618
42°	0,872	0,171	0,775	6,81	27,33	0,648
40°	0,883	0,156	0,713	7,45	30,13	0,676
38°	0,894	0,141	0,652	8,20	33,39	0,704
36°	0,905	0,128	0,592	9,08	37,20	0,732
34°	0,915	0,114	0,535	10,12	41,70	0,758
32°	0,924	0,102	0,479	11,36	47,07	0,783
30°	0,933	0,090	0,425	12,85	53,56	0,808
28°	0,941	0,079	0,374	14,68	61,48	0,831
26°	0,949	0,068	0,326	16,94	71,30	0,853
24°	0,957	0,058	0,280	19,80	83,68	0,874
22°	0,964	0,049	0,237	23,47	99,59	0,893
20°	0,970	0,041	0,197	28,30	120,50	0,911
18°	0,976	0,033	0,161	34,82	148,76	0,928
16°	0,981	0,026	0,128	43,95	188,28	0,943
14°	0,985	0,020	0,098	57,25	245,91	0,956
12°	0,989	0,015	0,073	77,75	334,71	0,967

IV. TÁBLÁZAT

Elméleti és kísérleti adatok összehasonlítása 8CB nematikus tartományában

$T (^{\circ}\text{C})$	Θ_0		$[\varepsilon(0) - \varepsilon(\infty)]_{\parallel-1}$		$[\varepsilon(0) - \varepsilon(\infty)]_{\parallel-2}$		$[\varepsilon(0) - \varepsilon(\infty)]_{\perp}$	
	$\Theta_0(1)$	$\Theta_0(2)$	elm.	kís.	elm.	kís.	elm.	kís.
37,5	28°	29°	10,70	9,66	0,89	0,82	4,21	4,23
36	26°	28°	10,87	10,00	0,78	0,75	4,02	3,86
34	25°	26°	10,94	10,20	0,75	0,62	3,57	3,43
32	22°	24°	11,12	10,36	0,63	0,50	3,01	3,14
30	18°	19°	11,30	10,50	0,40	0,35	2,10	2,50

Összegezve a következőket állapítottuk meg:

— a számolás eredményeként két Debye-relaxációt kaptunk párhuzamos orientációban és egyet merőlegesben. A $\parallel-1$ megfelel a rövid tengely körüli átfordulásnak, alacsony frekvencián jelentkezik és csak párhuzamos irányban. A $\parallel-2$ és \perp diszperziók a szabad rotációs diffúzió következményei, egymáshoz közeli frekvenciák jellemzik;

— az elméletben szereplő mennyiségek Θ_0 függése megegyezik a kísérleti értékek hőmérsékletfüggésével;

— $\Theta_0(1)$ és $\Theta_0(2)$ egymáshoz elfogadhatóan közeli értékei a modell megbízhatóságát bizonyítják. 8CB N tartományában Θ_0 -ra kapott 18° és 29° közötti szögértékek reálisak;

— a kísérleti és elméleti intenzitások egybeesése meglepően jó mindhárom relaxációs folyamatra;

— az elmélet ugyan nem adja meg a relaxációs időket, de következtethetünk azok arányára mivel $\Gamma \ll D$, így

$$\tau_{\parallel-2} \cong \frac{1}{DE_{1,0}(\Theta_0)},$$

és akkor nyilvánvalóan:

$$\frac{E_{1,0}(\Theta_0)}{E_{0,1}(\Theta_0)} \cong \frac{\tau_{\perp}}{\tau_{\parallel-2}} = 4,2$$

a reális esetben megvalósuló hőmérséklet, illetve Θ_0 tartományra. A kísérleti arány $\tau_{\perp}/\tau_{\parallel-2} = 10,6$ magasabb az elméletileg megadottnál, de szintén hőmérsékletfüggetlen, ami figyelemre méltó;

— további következtetések vonhatók le 8CB szmektikus fázisára. S_A -ban jóval nagyobb Θ_0 szöget kaptunk az $I_{\perp}/I_{\parallel-1}$, mint az $I_{\parallel-1}/I_{\parallel-2}$ arányból, ami arra mutat, hogy a molekula tengelyre merőleges fluktuációi lényegesen nagyobbak ebben az állapotban, mint a hossz tengely irányába esők. Ez alátámasztja de Vries [34] S_A modelljét, amely szerint a molekulák szöget zárnak be a direktorral, de a dőlés tetszőleges irányú és nem rendezhető egy kitüntetett irányba;

— meghatároztuk a rendparamétert:

$$S_\theta = \langle P_2(\cos \theta) \rangle_K = \frac{1}{2} \cos \Theta_0 (1 + \cos \Theta_0), \quad (16)$$

amely a III. táblázatban megadott hőmérséklettartományban 0,9 körül adódott. A (16) szerint számolt S_θ tekinthető a közeli rend mértékének, ellentétben az általában használt és egyéb módszerekkel meghatározott hosszú távú rendparaméterrel, amely a fenti hőmérsékleteken 0,5 körüli érték.

VI.2c Molekulatengellyel tetszőleges szöget bezáró dipólmomentum

Általános helyzetű ($\beta \neq 0$) permanens dipólmomentum esetén az előző pontban ismertetett út nem járható, mivel a (14) mozgásegyenletek a hossz tengely körüli forgást nem tartalmazzák.

A molekulamozgások leírását ebben az esetben a véletlen folyamatok elmélete alapján végeztük. A molekulatengely irányváltozásait folyadékkristály állapotban

rotációs Brown-mozgásnak tekintettük. Ennek során a részecske mozgása két összetevőre bontható:

— a fluktuációs elmozdulásra, amely a szomszédos molekulákkal való véletlenszerű ütközések eredményeként jön létre — azok kaotikus jellegű hőmozgásából származik;

— az átlagos (determinisztikus) elmozdulásra, amely a folyadék makroszkopikus mozgási sebessége révén jön létre valamely külső tér hatására (drift).

A véletlen folyamatok elméletében ez a mozgás homogén, diffúziós folyamat, amelyben a szögsebességek és forgatónyomatékok sztochasztikus változók; az idő véletlen függvényei. A folyamat valószínűségeloszlását pedig az ún. Fokker—Planck-egyenlet [37] határozza meg, amely általános, d dimenziós esetben a következő alakú:

$$\frac{\partial P(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \{D_{ij}(\mathbf{x}, t)P(\mathbf{x}, t)\} - \sum_{i=1}^d \frac{\partial}{\partial x_i} \{b_i(\mathbf{x}, t)P(\mathbf{x}, t)\},$$

ahol $b_i(\mathbf{x}, t)$ — időegységre eső átlagos elmozdulás,

$D_{ij}(\mathbf{x}, t)$ — átlagos négyzetes elmozdulás.

Alkalmazzuk a Fokker—Planck-egyenletet a folyadékkristály rendszerben megvalósuló, a 15. ábrán szemléltetett molekulaforgásokra. Ebben az esetben

$$D_{ij}(\mathbf{x}, t) = D_i > 0, \quad i = \Theta, \varphi, \gamma.$$

D_i — diffúziós állandó.

$b_i(\mathbf{x}, t) = -\Gamma\Theta$, mert az átlagos (determinisztikus) elmozdulást a folyadékkristály rendszerben a nematikus potenciál hozza létre, ami a molekulákat egymással párhuzamos irányba igyekszik elforgatni, tehát b_i csak Θ -tól függ. Ezek alapján a mozgásegyenletek a következők:

$$\frac{\partial P(\Theta, \Theta'; t)}{\partial t} = \frac{1}{2} D_\Theta \frac{\partial^2 P(\Theta, \Theta'; t)}{\partial \Theta^2} + \Gamma \frac{\partial}{\partial \Theta} [\Theta P(\Theta, \Theta'; t)], \quad (17a)$$

$$0 \leq \Theta \leq \pi;$$

$$\frac{\partial P(\varphi, \varphi'; t)}{\partial t} = \frac{1}{2} D_\varphi(\Theta) \frac{\partial^2 P(\varphi, \varphi'; t)}{\partial \varphi^2}, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi; \quad (17b)$$

$$\frac{\partial P(\gamma, \gamma'; t)}{\partial t} = \frac{1}{2} D_\gamma \frac{\partial^2 P(\gamma, \gamma'; t)}{\partial \gamma^2}, \quad 0 \leq \gamma \leq 2\pi. \quad (17c)$$

A (17) egyenletek alapmegoldásai a $P(\Theta, \Theta'; t)$, $P(\varphi, \varphi'; t)$ és $P(\gamma, \gamma'; t)$ átmeneti valószínűségek. D_Θ , $D_\varphi(\Theta)$ és D_γ — az adott szög szerinti rotációs diffúzió együtthatói, Γ — drift együttható.

Feltételeztük, hogy a forgások függetlenek, tehát Θ , φ és γ változók szerint a diffúziós egyenlet szétcsatlakozhat. φ és γ irányban szabad, rotációs diffúzió megy végbe, a (17b) és (17c) egyenleteket kielégítő eloszlásfüggvények normális (Gauss) eloszlásúak. A (17a) egyenletben a Θ szerinti szabad rotációs diffúzió mellett szerepel a nematikus potenciál által létrehozott drift: $\Gamma \partial / \partial \Theta (\Theta P)$ tag alakjában. Az előző fejezetben használt (14) empirikus formula a (17a) kifejezés egyszerűsített alakja.

A (17a) egyenlet a stochasztikus folyamatok elméletében Ornstein—Uhlenbeck-folyamatként ismert [38] és átmeneti valószínűsége:

$$P(\Theta, \Theta'; t) = C_\Theta \exp \left\{ -\frac{(\Theta - \Theta' e^{-\Gamma t})^2}{A(t)} \right\},$$

ahol

$$A(t) = \frac{D_\Theta}{\Gamma} (1 - e^{-2\Gamma t}).$$

A (17b) és (17c) Wiener-folyamatot írnak le, a megoldás

$$P(x, x'; t) = C_x \exp \left\{ -\frac{(x - x')^2}{2D_x t} \right\}$$

alakú, ahol $x = \varphi$ vagy γ .

A P átmeneti valószínűségek segítségével ki kell számolni a (12)-ben és (13)-ban adott $F_{\parallel}(t)$ és $F_{\perp}(t)$ dipólkorrelációs függvényeket. A Ψ és ϕ szögeket behelyettesítve $F_{\parallel}(t)$ -nek négy, $F_{\perp}(t)$ -nek kilenc tagja lesz. Ezen integrálok egyikének megoldása sem triviális, analitikus alakjuk nem ismert. Megmutatható azonban [39], hogy valamennyi korrelációs függvény időben exponenciálisan lecsengő tagokból áll. Az integrálok pontos alakjának meghatározása nélkül, azon megfontolások alapján, amiket a folyamatok várható értékeiről és szórásáról tudunk, a következő tagok várhatók a permittivitásra:

$$\begin{aligned} \varepsilon^*(\omega)_{\parallel} - \varepsilon(\infty)_{\parallel} \sim \frac{N\mu_m^2}{\varepsilon_0 kT} \left\{ \cos^2 \beta \frac{A_1}{1 + \frac{i\omega}{\Gamma}} + \cos^2 \beta \frac{A_2}{1 + \frac{i\omega}{D_\Theta + \Gamma}} + \right. \\ \left. + \sin^2 \beta \frac{A_3}{1 + \frac{i\omega}{D_\gamma + \Gamma}} + \sin^2 \beta \frac{A_4}{1 + \frac{i\omega}{D_\Theta + D_\gamma + \Gamma}} \right\}, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\varepsilon^*(\omega)_{\perp} - \varepsilon(\infty)_{\perp} \sim \frac{N\mu_m^2}{\varepsilon_0 kT} \left\{ \frac{B_1}{1 + \frac{i\omega}{D_\gamma + \Gamma}} + \frac{B_2}{1 + \frac{i\omega}{D_\Theta + D_\varphi}} + \frac{B_3}{1 + \frac{i\omega}{D_\varphi + D_\gamma + \Gamma}} \right\}.$$

A (18)-ban kapott eredményt a következőképpen értelmezzük:

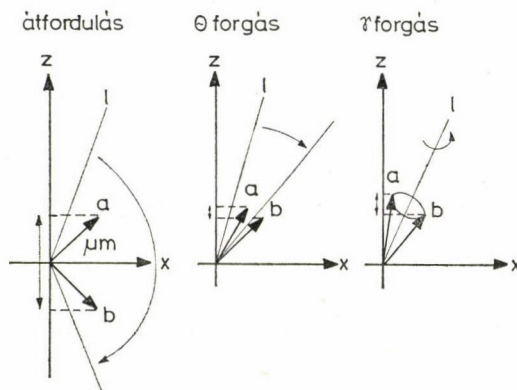
Párhuzamos orientáció

Négy relaxációs folyamatot kaptunk, $\tau_1 = \frac{1}{\Gamma}$, $\tau_2 = \frac{1}{D_\Theta + \Gamma}$, $\tau_3 = \frac{1}{D_\gamma + \Gamma}$ és $\tau_4 = \frac{1}{D_\Theta + D_\gamma + \Gamma}$ relaxációs időkkel. A (17a) egyenletben Γ fejezte ki a folyadék-kristályokra jellemző szimmetria (anizotrópia) megjelenését, ami egy lassú folyamatot, a rövid tengely körüli átfordulást eredményezett. τ_1 megfelel ennek a csak folyadékkristályokra jellemző dipólrelaxációnak, ami a kísérletekben az izotróp állapot-

ban mért diszperziós tartománynál több nagyságrenddel kisebb frekvencián ($\Gamma \approx 10^7$ Hz) jelent meg.

τ_2 , τ_3 és τ_4 nagyságrendekkel kisebb τ_1 -nél, mert a bennük szereplő D_θ és D_γ a megfelelő irányú szabad rotációs diffúzió állandói, amelyeket a molekula méretei és tehetetlenségi nyomatékai határoznak meg. D_θ és D_γ azonos nagyságrendű, sőt $D_{\text{izotróp}}$ -tól sem különböznek lényegesen, ami $\approx 10^{10}$ Hz. Mivel Γ több nagyságrenddel kisebb bármelyik D -nél, így mellettük elhanyagolható, tehát τ_2 , τ_3 és τ_4 egymáshoz közeli értékek. Az ennek megfelelő frekvenciatartományban egy Cole—Cole típusú diszperzió ($\parallel - 2$) mérhető, ami több, egymáshoz közeli folyamat szuperpozíciójára utal és igazolja az elméleti eredményt.

A folyamatok β függésének szemléltetésére bemutatjuk a 16. ábrát, amelyen a jelölések megegyeznek a 15. ábrán bevezetettekkel.



16. ábra. Molekulaforgások hatása a dipólmomentum direktor irányú vetületére

A modell szerint a Γ értékű kritikus frekvenciához tartozó forgás a rövid tengely körüli teljes átfordulás, melynek során a dipólmomentum a helyzetből b -be kerül. Az intenzitást a (μE) szorzatnak a két helyzet közötti különbsége határozza meg, amit párhuzamos orientáció esetén ($E \parallel n \parallel z$) a 16. ábrán μ_m z irányú vetületének változásával jelöltünk. A rövid tengely körüli átfordulást jellemző intenzitásnak maximálisnak kell lenni $\beta=0$ esetben, és el kell tűnnie $\beta=\pi/2$ -nél. A (18) kifejezésben kapott $\cos^2 \beta$ szorzó ennek eleget tesz, sőt azt is kifejezi, hogy ebben az alacsony frekvenciás folyamatban μ_m -nek csak a molekulatengellyel párhuzamos komponense (μ_l) vesz részt. A számolásnak ezt az eredményét kísérletekkel is igazoltuk (17. ábra).

A kísérletekben $\parallel - 2$ -vel jelölt nagyfrekvenciás diszperzióhoz (18) szerint két folyamat ad járulékot: a Θ és γ szerinti szabad rotációs diffúzió.

Az intenzitások β -függésének elemzéséhez a 16. ábra nyújt segítséget. A γ szerinti forgás hatása $\beta=\pi/2$ -nél maximális, $\beta=0$ -nál pedig megszűnik. Ez igazolódott be a (18) kifejezésben $\sin^2 \beta$ szorzó alakjában. A Θ szerinti diffúzió olyan hatást gyakorol a polarizációra, ami bármely β esetén véges értékhez vezet. A (18) szerint $\beta=0$ esetben a harmadik és negyedik tag eltűnik ugyan, de a második tag tartalmazza D_θ -t, és egyben visszkapjuk az erre az esetre számolt (15a) eredményt.

$\beta = \pi/2$ -nél az első két tag tűnik el, tehát az alacsony frekvenciás diszperzió megszűnése várható, a megmaradt nagyfrekvenciás folyamat viszont tartalmazza a γ és Θ szerinti relaxációt is. Ezzel az esettel a kísérleti összehasonlításnál külön foglalkozunk.

Modellünk szerint a molekulatengely n körüli forgása (φ) nem befolyásolja a párhuzamos irányú polarizációt, ennek megfelelően $\varepsilon^*(\omega)_{\parallel}$ független D_{φ} -tól. A modell-kísérlet és a számolás ezen eredményei kísérletileg ellenőrizhetők.

Merőleges orientáció

Az $F_{\perp}(t)$ korrelációs függvény teljes alakja kilenc tagból áll, a (18) kifejezésben megadott háromféle frekvenciafüggést eredményezve $\varepsilon^*(\omega)_{\perp}$ -ben.

A relaxációs idők:

$$\tau_5 = \frac{1}{D_{\varphi} + \Gamma}; \quad \tau_6 = \frac{1}{D_{\varphi} + D_{\theta}}; \quad \tau_7 = \frac{1}{D_{\varphi} + D_{\gamma} + \Gamma}$$

valamennyi azonos nagyságrendű, mert $\Gamma \ll D_{\theta} \approx D_{\varphi} \approx D_{\gamma}$. Ezért a folyamatok mindegyike egymáshoz közeli frekvencián jelentkezik, ami megfelel a kísérletileg megfigyelt egyetlen, de igen elnyújtott, Cole—Cole típusú nagyfrekvenciás diszperziónak. β hatását nem tüntettük fel (B_1 , B_2 és B_3 tartalmazza, β bonyolult trigonometrikus függvényei alakjában), mivel $\tau_5 \approx \tau_6 \approx \tau_7$ miatt kísérletileg úgy sem lehet őket szétválasztani.

Szeretném hangsúlyozni azt a tényt, hogy az $F_{\parallel}(t)$ -ben és $F_{\perp}(t)$ -ben szereplő, összesen 13 korrelációs függvény között mindössze egyetlen van, amely csak egy szög (Θ) korrelációját tartalmazza, ez $F_{\parallel}(t)$ első tagja, amely $\cos^2 \beta \langle \cos \Theta(0) \cos \Theta(t) \rangle$ -val egyenlő. A függvény első tagja $\sim e^{-t/\tau}$ alakú, az egyetlen, amely diffúziós állandót nem tartalmaz az exponensben, időbeli lecsengését csak a drift-együttható határozza meg. Ez teljes összhangban van azzal a kísérleti ténnyel, hogy az alacsonyfrekvenciás diszperzió csak a párhuzamos orientációban jelentkezik.

Kísérleti egybevetés

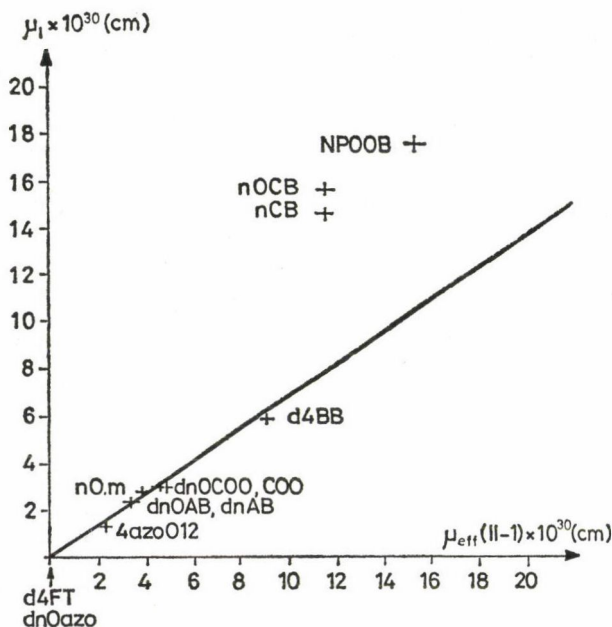
Az általános helyzetű ($\beta \neq 0$) dipólmomentum esetében végzett válaszméleti számolás eredményét a (18) kifejezések mutatják be. Ezek kísérleti ellenőrzésével foglalkozunk a továbbiakban. Kvantitatív összehasonlításra legalkalmasabb a $\parallel - 1$ diszperzió, elméleti szempontból azért, mert benne egyetlen folyamat, a rövid tengely körüli teljes átfordulás vesz részt, és mert az intenzitás β -függése is egyértelmű, valamint nagy számú kísérleti adat áll rendelkezésre. A $\parallel - 2$ és \perp diszperziók mindegyike két vagy több hasonló frekvencián jelentkező (tehát nem szeparálható) folyamat szuperpozíciója, ezért a β -függés nem ellenőrizhető, a mérési adatok száma pedig korlátozott.

Az elmélet és kísérlet összehasonlíthatósága érdekében bevezettük az effektív dipólmomentum μ_{eff} fogalmát. μ_{eff} -en értjük az adott diszperzió intenzitásából az Onsager-formulával (7) számolt μ értéket. Tehát pl. $\parallel - 1$ esetében:

$$\mu_{\text{eff}}^2(\parallel - 1) = \frac{9kT\varepsilon_0}{N} \frac{[\varepsilon(0)_{\parallel} - \varepsilon(\text{URH})_{\parallel}][2\varepsilon(0)_{\parallel} + \varepsilon(\text{URH})_{\parallel}]}{\varepsilon(0)_{\parallel}[\varepsilon(\text{URH})_{\parallel} + 2]^2}.$$

$\mu_{\text{eff}}(\parallel - 1)$ -et értelmezhetjük úgy, mint a $\parallel - 1$ diszperzió normált intenzitását, mivel nem tartalmaz olyan, anyagra jellemző paramétereket, mint molekulasúly, sűrűség, ezért olyan mennyiség, amit különböző anyagokra össze lehet vetni. Ez nem áll fenn a valódi növekményre: az $[\varepsilon(0)_{\parallel} - \varepsilon(\text{URH})_{\parallel}]$ értékre. μ_{eff} azonban felfogható úgy is, mint az adott folyamatban „résztevő” (relaxáló) dipólmomentum.

A (18)-ban kapott eredmény szerint a $\parallel - 1$ folyamat intenzitása $\cos^2 \beta \mu_m^2 = \mu_l^2$ -el arányos. A 17. ábrán μ_l -et mutatjuk be $\mu_{\text{eff}}(\parallel - 1)$ függvényében a II. táblázatban felsorolt különböző nematikus folyadékkristályra. A $\parallel - 1$ diszperziót valamennyi vegyület esetén Debye-típusúnak találtuk, amit a dielektromos permittivitás és veszteség 14. ábrán bemutatott frekvenciafüggése jellemez. A kísérleti pontokra a (6) szerinti $\varepsilon'(\omega)$ és $\varepsilon''(\omega)$ görbéket illesztettünk és meghatároztuk $\varepsilon(0)_{\parallel}$, $\varepsilon(\text{URH})_{\parallel}$ és $f_c(\parallel - 1)$ értékét. A $\mu_{\text{eff}}(\parallel - 1)$ mennyiséget ezekkel az értékekkel számoltuk. Az eredmény emlékeztet a 13. ábrán izotróp fázisra bemutatott $\mu_m(\mu_{\text{ons}})$ diagramra, bár attól lényegesen különböző információt hordoz, amelyet a következőképpen foglalnunk össze:



17. ábra. μ_l és a $\parallel - 1$ diszperzió növekményének kapcsolata

— $\mu_{\text{eff}}(\parallel - 1)$ beváltotta a hozzá fűzött elvárásokat, azonos μ_l -el rendelkező anyagsaládokra $\pm 3\%$ -os eltéréssel ugyanaz az érték kapódott [B8], [B12]. Ezért a 17. ábra pontjai (kereszttek) nem egy-egy anyagot, hanem anyagsoportokat, homológ sorokat jelölnek.

— $\mu_l < 10^{-29}$ Cm esetén a pontokra jó közelítéssel lehetett egy, az origón áthaladó egyenest illeszteni, amivel igazolva látjuk a számolás azon állítását, hogy a $\parallel - 1$ diszperzió növekménye μ_l^2 -el arányos. A meredekség, ami (18)-ban A_1 -nek felel meg, 2,1-nek adódott.

— bebizonyítottuk modellünk kiindulási feltételének jogosságát, amely szerint a molekulát merevnek tekintettük, és eredő dipólmomentumát a részmomentumok vektoriális összegeként értelmeztük. Ezt igazolja pl. az, hogy két egymással szemben álló alkoxi csoport nem ad járulékot $\mu_{\text{eff}}(\parallel - 1)$ -hez. Tehát a dinOazo homológ sort a 17. ábrán az origóban találjuk, holott $\mu_m = 5,6 \times 10^{-30}$ Cm (lásd 13. ábra). Ugyanezt támasztja alá az is, hogy valamely X hídcsoporthoz $R_1 = R_2$ végláncokat adva, ugyanazt a pontot kaptunk, pl. $X = \text{COO}$, $R_1 = R_2 = \text{alkil}$ egy pontba esett az $X = \text{COO}$, $R_1 = R_2 = \text{alkoxi}$ családdal, vagy $X = \text{NNO}$, $R_1 = R_2 = \text{alkil}$ ugyanott található, ahol $X = \text{NNO}$, $R_1 = R_2 = \text{alkoxi}$.

— feltevéseinket igazolja két speciálisan megválasztott anyag összehasonlítása: d4BB és d4FT, amelyek azonos molekulasúlyúak és hasonló felépítésűek, különbség mindössze a dipólmomentummal rendelkező COO csoportok egymáshoz képesti elhelyezkedésében van (lásd II. táblázat). d4BB-ben azonos helyzetben vannak, ami μ_l értékét megkétszerezi, d4FT-ben viszont szemben állnak, ami $\mu_l = 0$ -át eredményez. Utóbbi vegyületet azzal a kifejezett céllal „terveztük” és szintetizáltuk, hogy olyan anyagot kapjunk, amelynek eredő momentuma nem elhanyagolhatóan kis érték: $\mu_m = 5,6 \times 10^{-30}$ Cm, de nincs molekulatengellyel párhuzamos komponense, $\mu_l = 0$. Tehát a $(\parallel - 1)$ eltűnését vártuk a (18) alapján (mivel $\beta = \pi/2$), ami kísérletileg beigazolódott.

— három anyagtípus: az nCB és nOCB homológ sorok, valamint az NPOOB távol esnek a többi anyagra illesztett egyenestől. Ez a tény nem meglepő, a 13. ábra tanulságai alapján. Amennyiben ezek a molekulák már izotróp folyadékfázisban is antiferroelektromos közeli rendet mutatnak, akkor ez csak tovább erősödhet N fázisban. A közeli kölcsönhatások jellemzésére a párhuzamos orientációban bevezetjük a g_{\parallel} dipólkorrelációs tényezőt:

$$g_{\parallel} = \frac{\mu_{\text{eff}}^2(\parallel - 1)}{\mu_l^2 A_1}.$$

A kapott értékek a következők:

	nCB	nOCB	NPOOB
g_{\parallel}	$0,20 \pm 0,05$	$0,18 \pm 0,05$	$0,25 \pm 0,05$

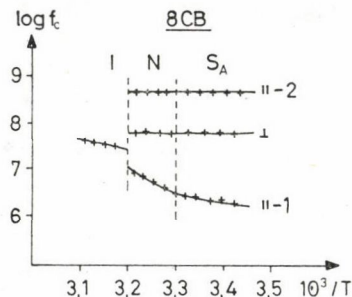
Tehát mindhárom csoportnál g_{\parallel} tovább csökkent az izotróp állapotban kapott g -hez képest.

VII. A RÉTEGSZERKEZET KIALAKULÁSÁNAK SZEREPE

Nematikus és szmektikus szerkezetek dinamikus viselkedésének vizsgálata során azt tapasztaltuk [B2], [B3], [B6], [B11], [B14], [B16], hogy a dipólrelaxáció a rétegszerkezetű folyadékkristályokban is a nematikusokra leírt módon megy végbe. Az összes vizsgált szmektikus folyadékkristályra is érvényes a 14. ábrán MBBA-ra bemutatott diszperziós kép. A rétegszerkezetű anyagokon is megfigyeltünk három, egymástól jól elkülönülő folyamatot. Ezzel a kísérleti ténnyel indokoljuk, hogy ugyanazokat a molekulamozgásokat tételezzük fel az alacsony hőmérsékletű fázisokban is, tehát a javasolt molekuladinamikai modell nem szorul alapvető változtatásra.

A rendezettség változásának hatását a diszperziós paraméterekre a kritikus frekvencia (f_c) hőmérsékletfüggésén keresztül mutatjuk be.

f_c hőmérsékletfüggését 8CB-n szemléltetjük a 18. ábrán. A frekvencia logaritmus linearis $1/T$ függvényében az egyes fázisokon belül.



18. ábra. Oktil ciano bifenil teljes dielektromos spektruma izotróp, nematikus és szmektikus—A állapotban

A $\parallel-2$ és \perp ág hőmérsékletfüggetlen, ami megfelel a hozzájuk rendelt molekula-dinamikai képnek: Θ , φ és γ szerinti gyors rotációs diffúzióknak. Valamennyi folyamatos, tetszőlegesen kis lépésekben végrehajtható mozgás és megengedett minden magas hőmérsékletű fázisban, csak a halszálkás szerkezetben válik részben gátolttá.

A $\parallel-1$ ág megfelel egy termikusan aktivált folyamatnak, amelyet potenciál-gáttal elválasztott két egyensúlyi helyzet közötti átmenetként értelmezhetünk. Folyadékkristály rendszerben a két stabil helyzethez Θ , ill. $\pi-\Theta$ szög tartozik, a mozgás pedig a rövid tengely körüli átfordulás, amelyet a $\parallel-1$ -hez rendeltünk, ami valamennyi folyadékkristály fázisban gátolt. A molekulának le kell győznie a szomszédok terétől származó potenciálgátat: W , ehhez elegendő energiája csak $\exp \{-W/kT\}$ időhányadban lesz, így az átmeneti frekvencia f_c :

$$f_c = f_0 \exp \{-W/kT\}, \quad (19)$$

ahol f_0 és W a molekula mint rotátor, sajátrezgési frekvenciája és aktiválási energiája. f_0 és W leolvasható az $1/T$ függvényében ábrázolt $\log f_c$ egyenesről.

A továbbiakban a $\parallel-1$ termikusan aktivált folyamat elemzésével foglalkozunk, megvizsgáljuk a szerkezetváltozások hatását f_0 -ra és W -re.

A vizsgált anyagokon különböző fázisokban kapott aktiválási energia $W = (0,6-4,2)$ eV, a sajátfrekvencia $f_0 = (10^{14}-10^{60})$ Hz intervallumba esett. A fent leírt interpretáció szerint f_0 az egyedi molekula sajátrezgésének frekvenciája [45], ami — reális méreteket figyelembe véve — $10^{12}-10^{13}$ Hz-nek felel meg. f_0 kísérleti értékeinek ettől több nagyságrenddel való eltérése nem magyarázható az individuális részecske sajátrezgésének ilyen mértékű megváltozásával. A probléma megoldásához Eyring abszolút reakciósebességekre kidolgozott elméletének [40] a dielektromos relaxációra való kiterjesztésével szeretnénk közelebb jutni. Ennek alapja az a tény, hogy mint a kondenzált rendszerekben zajló egyéb, pl. transzport folyamatok, úgy a dielektromos relaxáció sem tekinthető egyedi részecskék individuális mozgásának, hanem meghatározott sebességgel zajló kollektív folyamatnak. Ezért a molekula két egyensúlyi helyzete közötti átmenet nem csupán a mozgást végző részecske energiá-

jára lesz hatással, hanem annak környezetére is, tehát befolyásolja az egész dielektrikum szabad energiáját.

Eyring elmélete alapján módosul a (19)-ben szereplő mennyiségek jelentése. f_c a reakció sebességével azonos; és egyenlő:

$$f_c = C \cdot \exp \{ -\Delta F/kT \}, \quad (20)$$

ahol $C \approx 10^{13}$ Hz — anyagtól független univerzális frekvencia, ΔF — moláris szabadenergia változás az átfordulás hatására. Mivel $\Delta F = \Delta H - T\Delta S$, ahol ΔH és ΔS a rendszer belső energiájának; ill. entrópiájának változása,

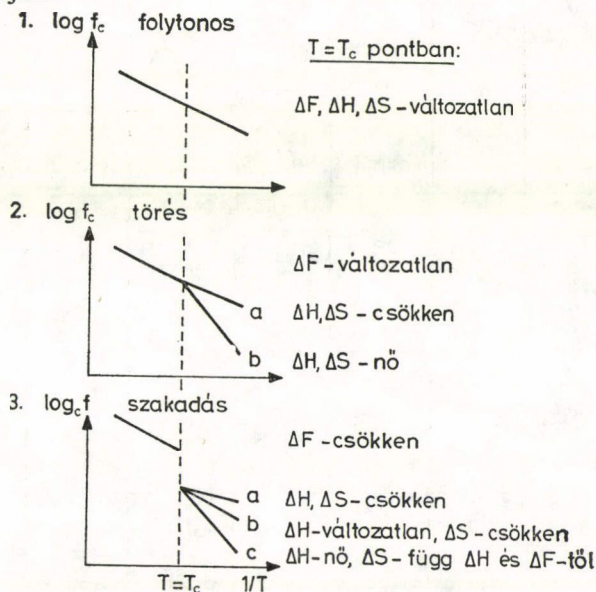
$$f_c = C \cdot e^{\Delta S/k} e^{-\Delta H/kT} = f_0 e^{-\Delta H/kT}, \quad (21)$$

tehát

$$f_0 = C \cdot e^{\Delta S/k}. \quad (22)$$

A (21) előnye (19)-cel szemben az, hogy a (21)-ben f_0 értéke nincsen limitálva a részecskék sajátfrekvenciájával, hanem tetszőleges lehet. További következmény, hogy (21) szerint a dielektromos relaxáció frekvenciáját, f_c -t a rendszer szabad-energiájának változása, a hőmérsékletfüggést, vagyis az aktiválási energiát a belső energia változása, f_0 -t pedig az entrópiaváltozás határozza meg. Mindhárom aktiválási mennyiség (ΔF , ΔH és ΔS) leolvasható a kísérleti görbékről, amelyek minden fázisban követik az Arrhenius-törvényt.

Az V. táblázatban néhány anyagra összesítettük a $\parallel -1$ disperziós ág aktiválási paramétereit. Feltüntetjük a folyadékkristály-fázisokat, amelyekkel a vizsgált vegyületek rendelkeznek, valamint ΔH értékét kJ/mol-ban és $\log f_0$ -t. Utóbbi mennyiségek fázisátmenetek közelében tapasztalt viselkedését három típusba soroltuk és a 19. ábrán szemléltettjük:



19. ábra. Arrhenius-görbe viselkedésének elemzése
a $T = T_c$ fázisátalakulási hőmérsékletnél

V. TÁBLÁZAT

A diszperzió paramétereinek megváltozása a fázisátmeneti pontokban

Vegyület		I.			II.			III.		
		$N \rightarrow S_A$	$S_A \rightarrow S_C$	$S_B \rightarrow S_F$	$S_A \rightarrow S_B$	$S_C \rightarrow S_B$	$S_C \rightarrow S_I$	$S_B \rightarrow S_E$	$S_F \rightarrow S_G$	$S_B \rightarrow S_G$
8CB	$\log f_0$ ΔH	T 18—14 81—52								
d7AB	$\log f_0$ ΔH	T 22,5—15 118—57								
60,6	$\log f_0$ ΔH	T 58,4—25,6 414—152			Sz: $\times 14$ 25,6—19,5 152—116					F 19,5—19,5 116—116
50,6	$\log f_0$ ΔH	T 26,5—21,3 150—118	F 21,3—21,3 118—118	F 20,8—20,8 121—121		Sz: $\times 12$ 21,3—20,8 118—121			Sz: $\times 2$ 20,8—20,3 121—121	
80BE2	$\log f_0$ ΔH				Sz: $\times 3$ 20,1—41,8 123—312			Sz: $\times 20$ 41,8—19,7 312—141		
DOBHOP	$\log f_0$ ΔH	T 46,2—31 314—191	T 31—21,5 191—127							
4 azo 012	$\log f_0$ ΔH	F 28,1—28,1 166—166	F 28,1—28,1 166—166				Sz: $\times 12$ 28—35,2 166—243			
7BEF5	$\log f_0$ ΔH	Sz: $\times 2,5$ 20,3—15,9 127—93			Sz: $\times 9$ 15,9—17,2 93—108			Sz: $\times 1,5$ 17,2—20,9 108—142		

1. Folytonos: a szerkezetváltozás nincs (mérhető) hatással $\log f_c(1/T)$ -re;
2. Törés: $T=T_c$ pontban f_c változatlan, a meredekség változik;
3. Szakadás: f_c ugrásszerűen csökken a fázisátalakulási pontban.

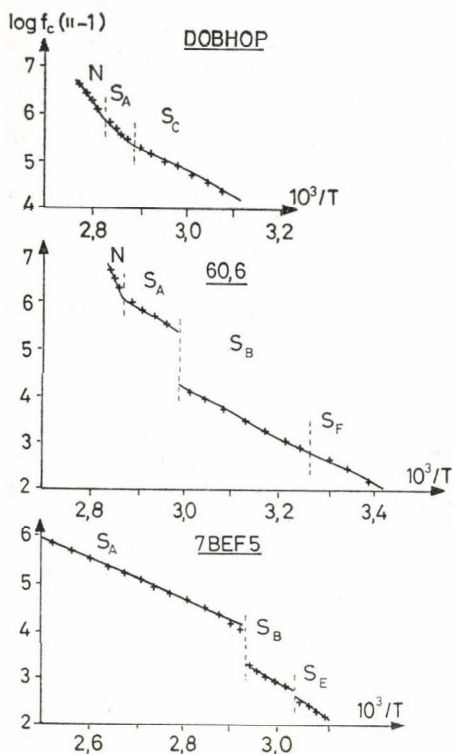
Az V. táblázatban megadtuk a frekvenciaváltozás nagyságát is a $T=T_c$ -hez két irányból közelítve mért frekvenciák arányával.

Az V. táblázat I. oszlopában a magas hőmérsékletű fázisokat (N , S_A , S_C) tüntettük fel. Ezek közös szerkezeti jellemzője, hogy a direktorra merőleges síkban nincs távoli rend, ezzel magyaráztuk a diszperziós paraméterek hasonlóságát. Ide soroltuk az 50.6-on megfigyelt S_B-S_F átmenetet is, ami a direktor dőlésszögének változását jelenti, hasonlóan az S_A-S_C átalakuláshoz, és nem eredményez rétegen belüli szerkezetváltozást.

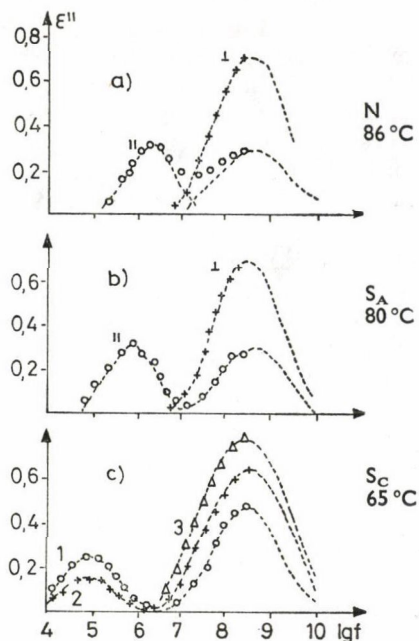
Az I. oszlopban feltüntetett fázisátalakulások folytonosan vagy töréssel mennek végbe. Szakadást egyetlen esetben tapasztaltunk, 7BEF5 $N-S_A$ átmeneténél, de f_c változása itt sem számottevő: $\times 2,5$. Levonható tehát az a következtetés, hogy a relaxációs idő folyamatosan változik a hőmérséklettel, az aktiválási energia pedig csökken a hidegebb fázisok irányában, vagy változatlan marad. Ennek következményeként f_0 is csökken, vagy nem változik, tehát a 19. ábrán szereplő 1. és 2a. variáció valósul meg. Példát a 20a. ábrán DOBHOP-on mutatunk be. Összegezve, elmondhatjuk, hogy önmagában sem a rétegszerkezet kialakulása ($N-S_A$, $N-S_C$), sem a direktor dőlésszögének változása ($N-S_C$, S_A-S_C , S_B-S_F) nem befolyásolja szembetűnően a $\parallel-1$ dielektromos relaxációt, frekvenciatartománya a 10^6 Hz nagyságrendben marad.

Érdekes kitérni a direktor-dőlésszög változásának vizsgálatára, amit DOBHOP S_C fázisában végeztünk el [B8]. A diszperziós mérések eredményét a három folyadék-kristály-fázis egy-egy hőmérsékletén mutatjuk be a 21. ábrán. A mérési irányok és azok jelölése a sztatikus adatokkal együtt a 9a ábrán láthatók. Az S_C fázisban mindhárom orientációban találtunk nagyfrekvenciás relaxációt, alacsonyfrekvenciás folyamatot csak 1 és 2 irányban. Ez utóbbit szemléltetjük a 22. ábrán, melyről leolvasható, hogy az N és S_A -ban közel azonos intenzitású $\parallel-1$ relaxáció jelen van S_C -ben is, és mindkét irányban (1 és 2) mérhető effektust eredményez. Az alacsony frekvenciás diszperziót S_C -ben is a molekula rövid tengelye körüli átfordulásával magyaráztuk, hasonlóan az ortogonális fázisokhoz. Ezáltal érthetővé vált az S_C-1 és S_C-2 diszperziók intenzitásának ellentétes hőmérsékletfüggése. Állításunk szerint ugyanazt a folyamatot — a rövid tengely körüli átfordulást — látjuk, mint N és S_A -ban, de S_C -ben két, egymásra merőleges irányból (1 és 2). Ezt alátámasztja az a kísérleti tény is, hogy az azonos hőmérsékletre tartozó kritikus frekvenciák S_C-1 -ben és S_C-2 -ben egybeesnek. Mivel a dőlésszög (Ω) a hőmérséklet csökkenésével nő (lásd 11. ábra), ezért a tengelyirányú dipólmomentum (μ_t) 1-el párhuzamos komponense és vele az S_C-1 diszperzió intenzitása csökken, míg 2 irányban nő. Az ellentétes hőmérsékletfüggés jól látható a 22. ábrán. Megjegyezzük, hogy ez az irodalomban az egyetlen ilyen jellegű mérés.

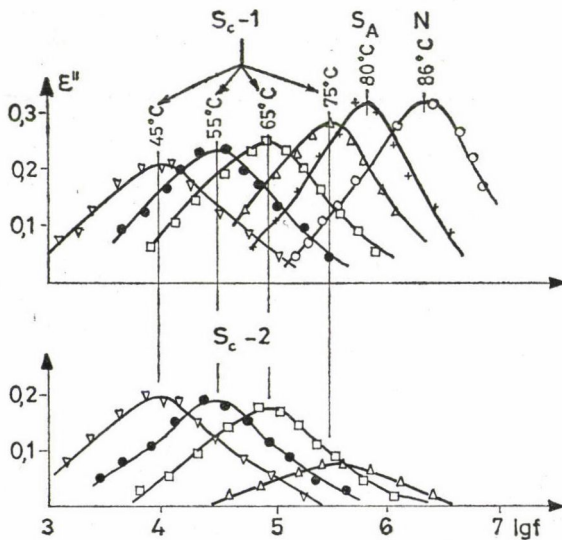
Az V. táblázat II. oszlopában feltüntetett fázisátmenetek mindegyikénél lényeges szerkezeti változás történik az S rétegen belül: a 2D folyadékból hexagonális rend alakul ki, kétdimenziós kristályosodás megy végbe. Valamennyi esetben szakadást tapasztaltunk az Arrhenius-függvény menetében a 19. ábra 3. esetének megfelelően. A kritikus frekvencia változása $T=T_c$ -nél számottevő, általában eléri, sőt meghaladja az egy nagyságrendet. ΔH változása nem tipikus, 60.6-nál csökken,



20. ábra. Folyadékkristályok $\parallel - 1$ diszperziójának Arrhenius-ábrázolása különböző fázisokban



21. ábra. DOBHOP dielektromos vesztesége frekvencia függvényében nematikus, szmeztikus—A és szmeztikus—C fázisban



22. ábra. DOBHOP alacsony frekvenciás diszperziója nematikus, szmeztikus—A és szmeztikus—C

50.6-nál és 7BEF5-nél közel változatlan és 80BE2-nél, illetve 4azo012-nél nő (19. ábra, 3a, 3b, 3c).

Következtetésünk az, hogy a rétegen belüli rendezetlenség \rightarrow rend átmenet a szabadenergia változás (ΔF) csökkenésével jár együtt. ΔH és ΔS változása nem jellemző, vegyületenként különbözik.

Az V. táblázat III. oszlopába soroltuk azokat a fázisátalakulásokat, amelyeknél hexagonális szerkezet alakul halszálkás struktúrává. Számottevő változást csupán 80BE2-nél tapasztaltunk, a többi anyagnál az aktiválási paraméterek alig vagy egyáltalán nem változtak. A $\parallel -1$ diszperzió ilyen viselkedése elfogadható, ha figyelembe vesszük, hogy a molekulák tömegközéppontjainak helyzete változatlan. A molekulásíkok irányának rögzítése a hengerszimmetria megszűnését jelenti, a halszálkás szerkezet a rétegen belül is anizotróp, ami — az eddigi tapasztalatok alapján — a hossztengetely körüli rotációra (γ -forgás) kell, hogy hatással legyen, tehát várható a nagyfrekvenciás ágak hőmérsékletfüggésének megjelenése.

A 3D-ban rendezett, alacsony hőmérsékletű szmektikus fázisok még további vizsgálatok tárgyát képezik.

VIII. INDUKÁLT SZMEKTIKUS FÁZISOK

A fázisindukció során két folyadékkristály elegyének bizonyos koncentráció-tartományában olyan szmektikus szerkezetek jönnek létre, amelyekkel a tiszta komponensek egyike sem rendelkezik.

Az indukált fázisok dielektromos vizsgálata több szempontból is indokolt. Az erősen deformált fázishatárok közötti területeken a keverék dielektromos jellemzői nemlineárisan változnak a koncentrációval, tehát új típusú kölcsönhatások megjelenésével kell számolni. Ezek felderítése hozzájárul a fázisindukció alapkérdésének megoldásához, a keverékben kialakult szerkezetek nagyfokú termikus stabilitásának megindoklásához.

Keverékek dielektromos viselkedésének vizsgálata gyakorlati szempontból is jelentős, mert a felhasználók szinte kizárólag két vagy több komponensű elegyeket alkalmaznak.

Vizsgálatainkat 80CB és EBBA elegyén végeztük, a fázisdiagramot [41]-ből vettük át, de a fázishatárokat leellenőriztük (23. ábra).

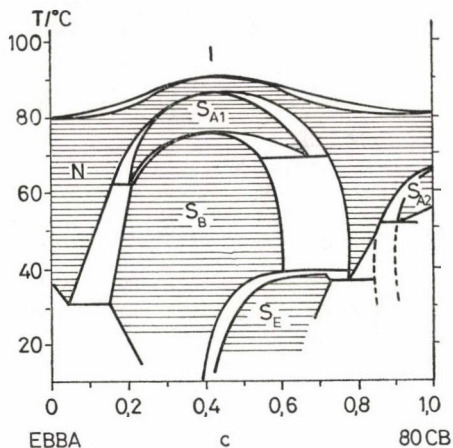
Az anyagkiválasztást a következő szempontok befolyásolták, amelyek egyben tartalmazzák célkitűzéseinket is a témában:

1. Elsődleges célunk az indukált S fázisok dielektromos vizsgálata volt és az eredmények összevetése egykomponensű rendszerek azonos szerkezetű fázisaival. Ennek a célnak a 80CB/EBBA kiválóan megfelelt, mivel $c=(0,2-0,7)$ mólarány intervallumban három indukált fázissal is rendelkezik: S_A , S_B és S_E (23. ábra).

2. A $c=(0,9-1,0)$ intervallumban saját (nem indukált) S fázisa is van a rendszernek, ami egy inkommenzurábilis, kettős rétegű S_{A2} , rétegvastagsága 80CB-ben: $d=1,4 \cdot L=3,2$ nm. Míg az indukált S_{A1} fázis egyrétegű, és 50%-os koncentrációnál mért rétegvastagsága:

$$d = \frac{L(EBBA) + L(80CB)}{2} = 2,2 \text{ nm.}$$

Alkalom nyílt tehát S_{A1} és S_{A2} összehasonlítására.



23. ábra. EBBA és 80CB keverékének fázisdiagramja

3. Szándékunk volt elemezni ε_{\parallel} -nek és ε_{\perp} -nek $N-S_A$ fázisátmenet környezetében tapasztalt viselkedését. Anomális változást $N-S_A$ átmenetnél először a dialkil azoxi homológ sor néhány tagján figyeltek meg [42], és a dipól–dipól kölcsönhatás megerősödésével magyaráztak, ami a közeli szomszédok egyre tökéletesebb antiferroelektromos (antiparalel) elrendeződéséhez vezet. A szerzők ezzel indokolták az orientációs polarizáció járulékának csökkenését ε_{\parallel} -hez, és növekedését ε_{\perp} -hez.

Számos anyagon elvégzett szisztematikus vizsgálataink szerint ε_{\perp} nem viselkedik egységesen különböző vegyületek $N-S_A$ fázisátmeneténél, de ε_{\parallel} valamennyi vizsgált anyag esetén csökken. Példákat a 8–10. ábrákon mutatunk be.

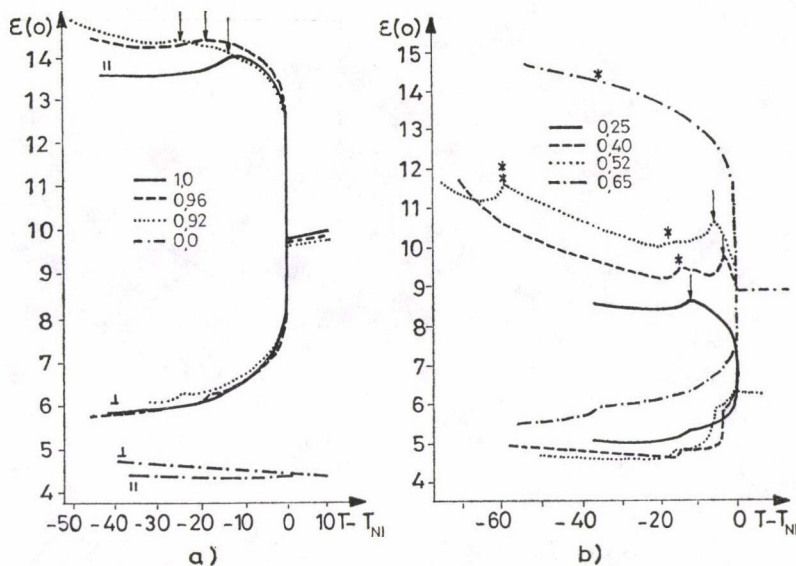
Ezen jelenségkör vizsgálatára igen alkalmas egy keverék, mert a koncentráció változtatásával folyamatosan alakítható át egy dipól közvetlen környezete. Mivel a 80CB és az EBBA molekula dipólmomentuma nagyság és irány szerint is különbözik egymástól, így a koncentráció változtatása látványos effektust kell hogy adjon, hiszen erősen változik a poláros környezet.

4. A két választott anyag szeparáció veszélye nélkül elegyedett egymással, mivel a komponensek molekuláris jellemzői (méret, molekulatömeg) és termikus stabilitása (T_{NI}) egymáshoz közeli értékek. Permanens dipólmomentumuk erősen eltérő nagysága és iránya viszont a dielektromos mennyiségek koncentrációérzékenységét eredményezi, tehát jól mérhető, nagy változások várhatók c függvényében.

VIII.1. Közeli és hosszútávú kölcsönhatások

A 24. ábrán néhány koncentráción mért statikus dielektromos állandót mutatunk be a hőmérséklet függvényében.

A 24a ábrán feltüntettük a két tiszta komponenst is ($c=1$ és 0). Jól látszik az eltérő dielektromos viselkedés: 80CB esetén a nagy, tengelyirányú dipólmomentum



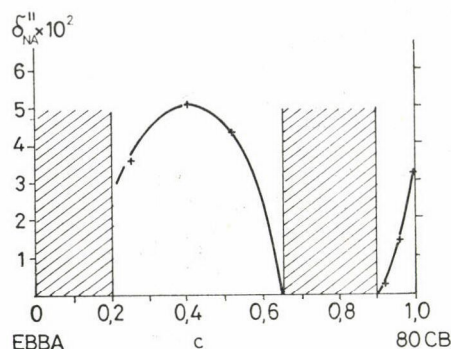
24. ábra. EBBA/80CB keverék sztatikus dielektromos állandójának hőmérsékletfüggése különböző koncentrációkon. A fázisátmenetek jelölése a következő: ↓ — T_{NA} ; * — T_{AB} ; * — T_{BE}

erős pozitív anizotrópiát eredményez, míg EBBA-ra ϵ_a kicsi és negatív. Ábrázoltunk még az S_{A2} -vel rendelkező koncentrációtartományból két görbét: $c=0,92$ és $0,96$. Látható, hogy ebben a tartományban a dielektromos permittivitást nem befolyásolta szembetűnően az EBBA jelenléte. Egyetlen figyelemre méltó különbség az $N-S_A$ átmenet környezetében nyilvánult meg. 80CB-ben $\epsilon_{||}$ és ϵ_{\perp} ugrásszerűen lecsökkent $T=T_{NA}$ -nál. Ez a változás egyre kisebb lett az EBBA koncentráció növelésével és szinte eltűnt $c=0,92$ -nél.

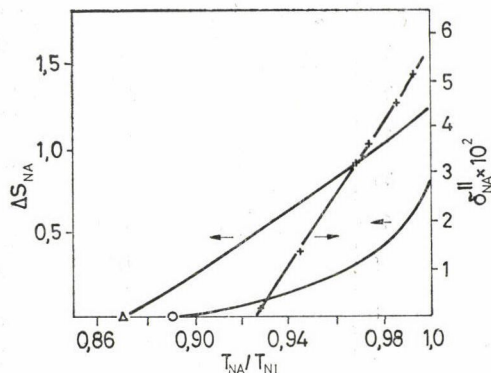
A 24b ábrán az indukált S fázisokat tartalmazó $c=0,2-0,65$ koncentrációtartományból mutatunk be néhány görbét. A sztatikus permittivitás nem mutatott különleges viselkedést az indukált fázisokban. Figyelemre méltó az a tény, hogy $\epsilon_{||}$ és ϵ_{\perp} ugrásszerű csökkenése, az $N-S_{A1}$ átmenetnél újra fellépett és a változás (lépcső) maximumot ért el az indukció optimális feltételét biztosító $c=0,4$ mólarány-nál. $\epsilon_{||}$ $N-S_A$ fázisátmenetnél tapasztalt csökkenésének kvantitatív jellemzésére bevezettük a $\delta_{NA}^{||}$ mennyiséget:

$$\delta_{NA}^{||} = 1 - \frac{\min \epsilon_{||} (S_A\text{-ban})}{\epsilon_{||} (T = T_{NA})}.$$

A 25. ábrán $\delta_{NA}^{||}$ -t mutatjuk be a koncentráció függvényében. A bevonalazott területek olyan koncentrációtartományokat jelölnek, amelyekben nincs a rendszernek S_A fázisa. A mérési pontokat összekötő görbe követi a 23. ábrán látható $N-S_A$ fázis-határvonalat. Ez a hasonlóság ad alapot $\delta_{NA}^{||}$ -nak T_{NA}/T_{NI} függvényében való ábrázolására, amely jó közelítésben egyenest adott (lásd 26. ábra). A $N-S_A$ fázisátalakulást McMillan és Lee analizálták [43]. Távoli, diszperzív kölcsönhatásokat véve figyelembe az átmeneti entrópiaváltozást határozták meg és megadtak egy univer-



25. ábra. A sztatikus dielektromos permittivitás $T = T_{NA}$ fázisátalakulásnál mért változásának $(\delta_{NA}^{\parallel})$ koncentrációfüggése



26. ábra. Az entrópiaváltozás ΔS_{NA} és dielektromos állandó változás δ_{NA}^{\parallel} T_{NA}/T_{NI} függése. Δ — McMillan-elmélet; 0 — Lee-elmélet; + — dielektromos mérési pontok

zális T_{NA}/T_{NI} értéket (ez McMillan eredeti munkájában: 0,87, Lee-nél: 0,89 — lásd 26. ábra), amely érték fölött az $N-S_A$ fázisátmenet elsőrendű, alatta pedig másodrendű. Az általunk ábrázolt dielektromos állandó változás: δ_{NA}^{\parallel} az előbbiekhöz hasonló törvényt követ és $T_{NA}/T_{NI}=0,93$ -nál éri el a nullát.

A 26. ábra alapján δ_{NA}^{\parallel} megadható az N hőmérséklet-tartomány hosszának $\Delta T = T_{NI} - T_{NA}$ függvényében:

$$\delta_{NA}^{\parallel}(\Delta T) = \delta_{NA}^{\parallel}(0) \left[1 - \frac{\Delta T}{\Delta T_c} \right],$$

ahol

$$\Delta T_c = \Delta T|_{T_{NA} = 0,93 T_{NI}} = 0,07 T_{NI}.$$

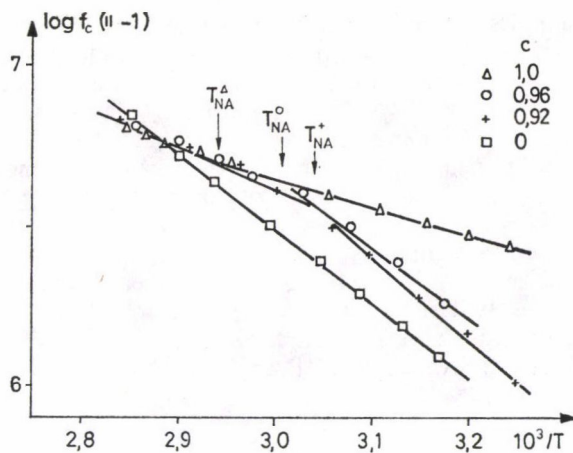
Következtetésünk az, hogy δ_{NA}^{\parallel} -t nem lehet kizárólag a rövidtávú, dipól–dipól kölcsönhatás megváltozásaként interpretálni, hiszen viselkedését termodinamikai, hosszútávú effektusok vezérlik. Ez az eredmény felveti a VI.1 fejezetben bevezetett g paraméter értelmezésére kidolgozott modellek [42], [44] újabb analizisének szükségességét.

Kiemeljük azt a tényt is, hogy δ_{NA}^{\parallel} egységesen viselkedik S_{A1} és S_{A2} fázisban T_{NA}/T_{NI} függvényében.

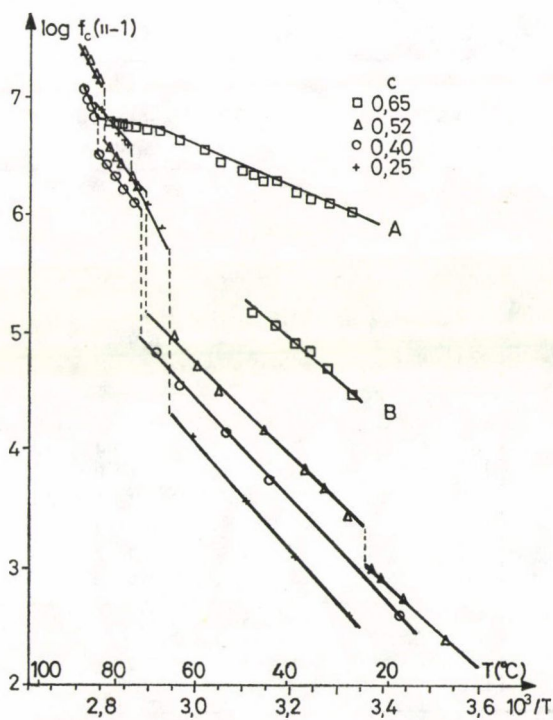
VIII.2. Aktiválási energia és termikus stabilitás

Megvizsgáltuk az elegy dinamikus viselkedését is. Az eddigiekhez hasonlóan a $\parallel - 1$ (alacsonyfrekvenciás) diszperzióval foglalkozunk részletesen.

A 27. ábrán az EBBA ($c=0$), valamint az S_{A2} -vel rendelkező koncentrációtartományhoz tartozó $c=1$; 0,96 és 0,92 keverékek Arrhenius-görbéi láthatók. A ΔH és $\log f_0$ értékeket a VI. táblázat tartalmazza. 80CB viselkedése az $N-S_{A2}$ fázisátmenetnél megegyezett az eddig tárgyalt egykomponensű rendszerekkel (lásd V. táblázat, I. oszlop), $\log f_c$ enyhe törést mutatott $N-S_{A2}$ -nél és ΔH csökkent



27. ábra. EBBA/80CB keverék $||-1$ diszperziójának Arrhenius-ábrázolása különböző koncentrációkon



28. ábra. EBBA/80CB keverék $||-1$ diszperziójának Arrhenius-ábrázolása különböző koncentrációkon

a hidegebb fázisban. Kis mennyiségben hozzáadagolt ($c=0,96$ és $0,92$) EBBA nem befolyásolta az N tartomány aktiválási paramétereit, de az elegy eddig nem tapasztalt jelleget mutatott az $N-S_{A2}$ fázisátmenetnél, ΔH nőtt az S fázisban (lásd 19. ábra 2b eset) annyira, hogy ΔH $N-S_{A2}$ -nél mért változása előjelet váltott.

Az indukált S tartományban négy koncentrációnál vettünk fel diszperziós görbékét, a $\parallel-1$ ágakat mutatjuk be a 28. ábrán, az aktiválási paraméterek pedig a VI. táblázatban találhatók. Az indukált fázisokra vonatkozó megfigyeléseink a következők:

1. Egy-egy koncentrációhoz tartozó Arrhenius-görbék sajátosságai megegyeznek az azonos szerkezetű fázisokkal rendelkező egykomponensű rendszerek jellemzőivel. Az indukált fázisok aktiválási paraméterei ugyanazon határok között találhatók, mint az azonos szerkezetű, nem indukált fázisoké (vö. V. és VI. táblázatokat). A $\parallel-1$ folyamat kritikus frekvenciájának fázisátalakulások körüli változása csak a

VI. TÁBLÁZAT

A diszperzió paramétereinek megváltozása a fázisátmeneti pontokban
80CB/EBBA keverékben

c		$N \longrightarrow S_A \longrightarrow S_B \longrightarrow S_E$					h
1	$\log f_0$ ΔH	10,6 29	T	9,1 19,2	— —	—	+10
0,96	$\log f_0$ ΔH	10,6 29	T	13,2 49	—	—	-20
0,92	$\log f_0$ ΔH	10,6 29	T	14,2 56,5	—	—	-27,5
0,65	$\log f_0$ ΔH	10 26	T	12,7 39,5	Sz: $\times 9$ 16,4 81,4	—	
0,52	$\log f_0$ ΔH	27,8 167	Sz: $\times 3$	20,6 118	Sz: $\times 10$ 16,5 88,6	Sz: $\times 2$ 15,5 84	+49
0,40	$\log f_0$ ΔH	30 190	Sz: $\times 1,7$	22,5 129	Sz: $\times 11$ 17,2 96	—	+61
0,25	$\log f_0$ ΔH	21,6 119	Sz: $\times 1,6$	28,3 174	Sz: $\times 24$ 17,7 102	—	-55
0	$\log f_0$ ΔH	13,5 52,6	—	—	—	—	—

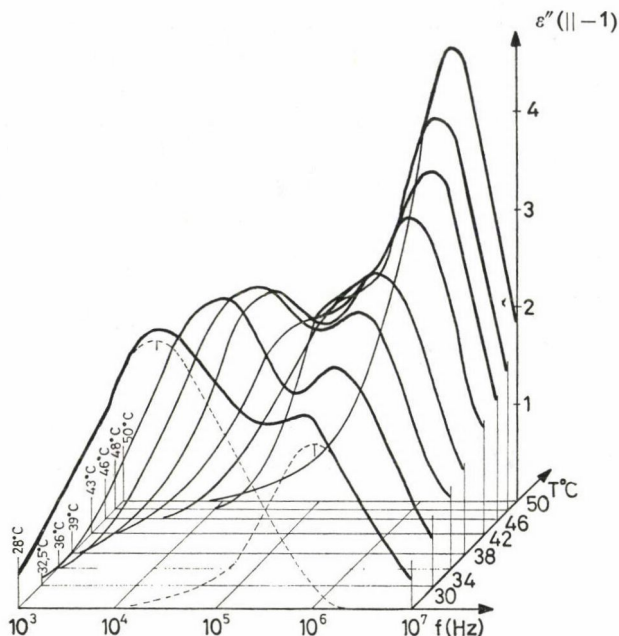
struktúrától függ. Jelentős, egy nagyságrendnyi változást az indukált S_B megjelenése is előidézett, hasonlóan az V. táblázat II. oszlopában bemutatott átmenetekhez. Az $N-S_A$ -nál törést, míg S_B-S_E -nél néhányszoros csökkenést tapasztaltunk, az egykomponensű rendszerek megfelelő fázisátmeneteihez hasonlóan. Ezért a fázison belüli f_c tartományt szerkezetmeghatározásra lehet használni. A dielektromos diszperzió önállóan természetesen nem elégséges a fázisok definiálására, de egyéb módszerekkel kiegészítve alkalmas lehet. Mint az eddigieknél láttuk, a $\parallel-1$ dipól-relaxáció a rétegen belüli rendezettség változására érzékeny különösen.

2. Megvizsgáltuk a VI. táblázat függőleges oszlopait, tehát az aktiválási energia értékét különböző koncentrációknál egy-egy fázison belül. N fázisban $c=1$ -nél $\Delta H=29$ kJ/mól, c csökkenésével ΔH nő és maximális 190 kJ/mól értéket ér el $c=0,4$ -nél, majd újra csökken. A rétegszerkezetű fázisokban (S_A , S_B , S_E) ΔH monoton nő a koncentráció csökkenésével és nem mutat maximumot.

Foglalkozunk ΔH változásával az $N-S_A$ fázisátalakulásnál. Jelöljük $[\Delta H(N) - \Delta H(S_A)] = h$ -val. $c=1$ -nél $h>0$ és a koncentráció csökkenésével csökken, $c=0,92$ -nél $h=-27,5$ kJ/mól. Ebben a c tartományban a rétegszerkezet stabilitása nyilvánvalóan csökken a koncentrációval. Az erősen végpoláros 80CB kettős rétegű S_{A2} szerkezetét a fokozatosan hozzáadagolt EBBA „összetöri”, „szétzilálja”. A $c=0,4$ -hez tartozó keverék viszont erősen preferálja a rétegszerkezetet (lásd fázisdiagram), itt $h=+61$ maximális értéket kaptunk. $c=0,25$ -nél az indukció megszűnőben van, $h=-55$ kJ/mól. Kézenfekvő tehát az aktiválási energia fázisátalakulásnál megfigyelt változását a kialakult rendezettebb struktúra termikus stabilitásával összefüggésbe hozni. Az aktiválási paramétereknek a VII. részben javasolt értelmezése szerint ΔH -n a molekulák rövid tengelye körüli átfordulásából származó belső energiaváltozást értjük a rendszerben. N fázisban ΔH -t anyagi paraméterek, jelen esetben az összetétel határozza meg és különböző értékeket vehet fel a koncentráció függvényében. A rétegszerkezet kialakulásakor történt megváltozása azonban csak a szerkezet (a távoli rend átalakulásának) függvénye.

3. Érdemes külön kitérni a $c=0,65$ koncentrációhoz tartozó keveréken tapasztalt viselkedésre. A fázisdiagram szerint ez a molarány széles hőmérséklet-intervallumban kevert fázisokkal rendelkezik, tehát egyidejűleg két folyadékkristály szerkezet található meg benne termikus egyensúlyban (üresen hagyott területek a fázisdiagramon). A jelenlevő két struktúra térfogataránya a hőmérséklettel változik, hűtésekor a rendezettebb szerkezet mennyisége nő. Az $\varepsilon(0)$ sztatikus permittivitás hőmérsékletfüggéséről nem olvasható le a S_A megjelenése. $\varepsilon(0)_{\parallel}$ és $\varepsilon(0)_{\perp}$ folytonos, sima görbét ad 85 és 50 °C között. Az $f_c(\parallel-1)$ Arrhenius-görbéjén viszont 70 °C-nál egy határozott törés látható, ami arra utal, hogy fázisátmenet történt, vagy legalább részben kialakult a rétegszerkezet. 50 °C-nál az $f_c(\parallel-1)$ diszperzió két ágra hasad, a 28. ábrán A -val és B -vel jelöltük. A felső ág az 50 °C felettinek a folytatása, az alsó — 100 kHz alatti — ág pedig közel egy nagyságrendnyi szakadással rendelkezik és az A ágtól független, attól eltérő aktiválási energia jellemzi. Ezt a különleges viselkedést a következőképpen interpretáljuk:

85—70 °C között nematikus a rendszer, 70 °C-nál S_A tartományok keletkeznek benne, de valószínűleg N mátrixba ágyazva. Az N és S_A fázist általában jellemző aktiválási paraméterek egymáshoz közeli értéke nem teszi lehetővé a szétválasztást. 50 °C-nál minden kétséget kizáróan S_B jelenik meg (B ág) és térfogataránya a hőmérséklet csökkenésével nő. Ezt szemléletesen illusztrálja a 29. ábra, amelyen $\varepsilon''(\parallel-1)$ -t ábrázoltuk a frekvencia függvényében néhány hőmérsékleten. 50 °C-nál



29. ábra. EBBA/80CB $c=0,65$ molarányú keverékének veszteségi görbéi a $\parallel-1$ diszperzióban, különböző hőmérsékleteken

még egyetlen Debye-relaxáció figyelhető meg, aminek a mérési pontokra illesztett folytonos vonal felel meg. Alacsonyabb hőmérsékleteken jól látható a felhasadás. Mivel mindkét relaxáció $\parallel-1$ folyamat, csak különböző fázisokhoz tartozik, ezért joggal felbontható két Debye-görbére. A felbontást a 28 °C-os felvételen mutatjuk be. Szaggatott vonallal jelöltük a számolt görbét, amelyek összege a folytonos vonallal jelölt kísérleti értéket adja. A két diszperzió intenzitása ellentétesen változik a hőmérséklet függvényében, a B ág hűtésekor felerősödik, míg az A ugyanakkor elfogy.

Ez a kísérlet szemlélteti a dielektromos diszperzió alkalmasságát fázisok elkülönítésére, sőt ebben az esetben a polarizációs mikroszkóppal felvett fázisdiagram (23. ábra [41]) korrigálására. Biztonsággal állíthatjuk, hogy a $c=0,65$ koncentráción az S_B 50 °C-on jelenik meg, nem pedig 70 °C körül, ahogyan az a textúrák mikroszkópban történt megfigyeléséből következett.

ÖSSZEFOGLALÁS

Az értekezés összefoglalja nematikus és szmektikus folyadékkristályokon végzett dielektromos vizsgálataim eredményeit.

A méréseket széles hőmérséklet-intervallumban, a kiválasztott vegyületek valamennyi fázisában elvégeztem. A molekuláris és makroszkopikus paraméterek közötti

összefüggés megtalálása érdekében széles tartományban változtattam a permanens dipólmomentum nagyságát és molekulatengellyel bezárt szögét. Törekedtem a teljes dielektromos spektrum felvételére, ami a frekvenciafüggő komplex permittivitás mérését jelentette (10^2 – 10^{10}) Hz tartományban. Elsőként alkalmaztam sweeperrel ellátott hálózatanalizátort a mikrohullámú tartományban folyadékkristályok impedanciájának felvételére.

Az adatok rendszerezése és feldolgozása során kapott eredmények a következőképpen foglalhatók össze:

Megállapítottam, hogy folyadékkristályok izotróp folyadékfázisában a dielektromos növekmény jól leírható az Onsager-formulával gyengén poláros vegyületeknél. Erősen végpoláros molekulák esetén a közeli dipól–dipól kölcsönhatás megjelenésével és az ezáltal eredményezett antiferroelektromos lokális renddel magyaráztam az Onsager-modelltől való eltérést. Meghatároztam az érintett anyagok dipól–dipól korrelációs tényezőjét.

Megállapítottam, hogy folyadékkristály állapotban a molekulaszervezettől és a dipólmomentum nagyságától és irányától függetlenül a dipólrelaxáció által eredményezett diszperziós viselkedés egységes és egy közös modellel tárgyalható. Megcáfoltam intramolekuláris mozgások feltételezett hatását $\varepsilon^*(\omega)$ -ra. Bebizonyítottam, hogy a dielektromos diszperzió tartományában ($\sim 10^{10}$ Hz-ig) az eredő momentum relaxál, az egész — merevnek tekinthető — molekula elfordulása révén. Felhasználtam a statisztikus mechanika lineáris válaszméletét, aminek segítségével $\varepsilon^*(\omega)$ számolása molekuláris korrelációs függvények meghatározására vezethető vissza. A tér nélküli, egyensúlyi orientációs eloszlásfüggvényt a véletlen folyamatok elméletének segítségével határoztam meg. A folyadékkristály molekula rotációs mozgását folytonos diffúziós folyamatnak tekintettem. Ebben az esetben az eloszlásfüggvény kielégíti a Fokker–Planck-egyenletet.

Elvégeztem a számolást molekulatengellyel párhuzamos momentum esetére és a kísérletekkel igen jó egyezésben levő eredményt kaptam.

A molekulatengellyel tetszőleges szöget bezáró momentum esetén a korrelációs függvények számolásánál az időfüggés jellegét sikerült meghatározni. Ezért az $\varepsilon^*(\omega)$ -ra kapott kifejezések leírják a frekvenciafüggést és tartalmazzák a momentum tengellyel bezárt szögének (β) hatását az egyes diszperziós tartományok növekményére. A részletes, kvantitatív összehasonlítást a \parallel – \perp diszperziós folyamatra végeztem el.

Elsőként kezdtem foglalkozni szmektikus folyadékkristályok dielektromos vizsgálatával. Módszert dolgoztam ki a dőlt fázisok dielektromos tenzorának és a direktor dőlésszög hőmérsékletfüggésének meghatározására. Tanulmányoztam a rétegszerkezet kialakulása és a rétegen belüli további szerkezetváltozások hatását a dielektromos viselkedésre. Vizsgáltam a kritikus frekvencia hőmérsékletfüggését és elemeztem a viselkedést fázisátalakulási hőmérsékletek közelében.

Megállapítottam, hogy másodrendű fázisátalakulások közelében, mint pl. a rétegszerkezet kialakulása vagy a direktor dőlésszögének változása, a \parallel – \perp relaxáció aktiválási paraméterei nem változnak számottevően. A rétegen belüli elsőrendű rendezetlenség \rightarrow rend átmenetek viszont a kritikus frekvencia jelentős csökkenését eredményezik.

Vizsgáltam folyadékkristály elegyek dielektromos viselkedését, ennek kapcsán foglalkoztam indukált szmektikus fázisokkal, valamint kommenzurábilis ($N-S_{A1}$) és inkommenzurábilis ($N-S_{A2}$) fázisátalakulások összehasonlításával.

Megállapítottam, hogy a sztatikus permittivitás egységesen viselkedik $N-S_{A1}$ és $N-S_{A2}$ fázisátmenetek közelében. Bizonyítottam, hogy $\varepsilon_{||}(0)$ ugrásszerű csökkenése $N-S_A$ átalakulásnál nem magyarázható kizárólag a közeli dipól–dipól kölcsönhatással, hanem a fázisátmenet rendűségével, és a T_{NA}/T_{NI} hőmérsékletarányal kapcsolható össze.

A dinamikai vizsgálatok során arra a következtetésre jutottam, hogy a keverékben indukált fázisok aktiválási paraméterei megegyeznek az egykomponensű rendszerek azonos szerkezetű fázisainak jellemzőivel. Tehát a dielektromos diszperziót szerkezet-meghatározásra lehet használni, amit bizonyítottam egyidejűleg jelenlevő N és S_B fázisok dielektromos úton való detektálásával. Elemeztem az aktiválási paraméterek változását a keverékben, hőmérséklet és koncentráció függvényében.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Köszönettel tartozom elsősorban *Bata Lajosnak*, a fizikai tudományok doktorának, amiért figyelmemet a témára irányította, munkámat mindvégig sokoldalúan támogatta és mindenben elősegítette.

Pintér Katalin és *Horst Kresse* különleges, kereskedelembe nem kapható vegyületekkel láttak el, ezáltal jelentősen hozzájárultak elképzeléseim megvalósításához. *Francois Leyvraz* a számolásban és programozásban volt partnerem.

A dielektromos méréstechnika részleteivel *Alun Price* ismertetett meg Aberystwythben, *Wim de Jeu* pedig lehetővé tette, hogy Groningenben elvégezzem a diamágneses szuszceptibilitás méréseket.

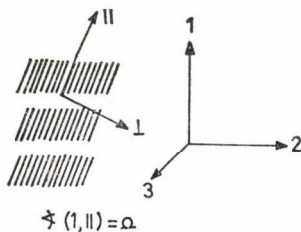
Köszönetet mondok *Dankovits Lászlónak* azért az odaadó segítségért, amit munkám során és a dolgozat elkészítése közben tőle kaptam.

Megköszönöm *Polgár Juliannának* az értekezés gondos gépelését.

Hálás vagyok valamennyi közvetlen munkatársamnak a velük folytatott konzultációkért.

FÜGGELÉK

I. A direktor dőlésszögének kiszámítása S_C fázisban



$\angle(1, 11) = \Omega$

ugyanakkor: $P_1 = \varepsilon_1 E_1$.

Tehát:

2. ε_2 mérése:

1. ε_1 mérésekor:

$$E = E_1;$$

$$P^{||} = \varepsilon_{||} E_1 \cos \Omega;$$

$$P^{\perp} = \varepsilon_{\perp} E_1 \sin \Omega;$$

$$\begin{aligned} P_1 &= P_1^{||} + P_1^{\perp} = \\ &= \varepsilon_{||} E_1 \cos^2 \Omega + \\ &+ \varepsilon_{\perp} E_1 \sin^2 \Omega, \end{aligned}$$

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_{||} \cos^2 \Omega + \varepsilon_{\perp} \sin^2 \Omega. \quad (a)$$

$$E = E_2;$$

$$P^{||} = \varepsilon_{||} E_2 \sin \Omega;$$

$$P^{\perp} = \varepsilon_{\perp} E_2 \cos \Omega;$$

$$\begin{aligned} P_2 &= E_2 (\varepsilon_{||} \sin^2 \Omega + \varepsilon_{\perp} \cos^2 \Omega); \\ \varepsilon_2 &= \varepsilon_{||} \sin^2 \Omega + \varepsilon_{\perp} \cos^2 \Omega. \end{aligned} \quad (b)$$

3. ε_3 mérése:

$$\varepsilon_3 = \varepsilon_{\perp}.$$

(c)

(a), (b) és (c) kifejezésekből kapjuk:

$$\sin^2 \Omega = \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2}{2\varepsilon_3 - \varepsilon_2 - \varepsilon_1}.$$

II. A frekvenciafüggő permittivitás meghatározása

Párhuzamos orientáció

Elhanyagoljuk a különböző kezdeti feltételek szerinti átlagolást, mivel a feladat hengerszimmetrikus a z -tengely körül, ezért feltételezzük, hogy:

$$\Theta(0) = \varphi(0) = 0.$$

Akkor a korrelációs függvény:

$$F_{11}(t) = N\mu_m^2 \int_K ds \cos \Theta(t) G_{11}(\Theta, \varphi; t),$$

ahol $G_{11}(\Theta, \varphi; t)$ kielégíti a (14)-ből kapott mozgásegyenletet, a kezdeti és határfeltételekkel

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_{11}(\Theta, \varphi; t)}{\partial t} &= D\Delta G_{11}(\Theta, \varphi; t) - 2\Gamma G_{11}(\Theta, \varphi; t); \\ G_{11}(\Theta, \varphi; 0) &= \delta(\Theta)\delta(\varphi), \quad \nabla G_{11}(\Theta_0, \varphi) = 0. \end{aligned} \quad (14a)$$

A (14a) másodfokú, parciális differenciálegyenlet megoldását a következő alakban keressük:

$$G_{11}(\Theta, \varphi; t) = \sum_{n,m=0}^{\infty} \phi_{n,m}(\Theta) e^{im\varphi} e^{-(DE_{n,m} + 2\Gamma)t},$$

ahol

$$\begin{aligned} \Delta(\phi_{n,m}(\Theta) e^{im\varphi}) &= E_{n,m} \phi_{n,m}(\Theta) e^{im\varphi}, \\ \nabla(\phi_{n,m}(\Theta_0) e^{im\varphi}) &= 0. \end{aligned}$$

Mivel $F_{11}(t)$ -t keressük, így elégséges az $m=0$ esettel foglalkozni. A normálásból következik, hogy

$$\phi_{n,0}(0) = \langle |\phi_{n,0}(\Theta)|^2 \rangle_K$$

és

$$\phi_{0,0}(\Theta) = 1.$$

Akkor $F_{11}(t)$ -re kapjuk:

$$F_{11}(t) = N\mu_m^2 \int_K ds \cos \Theta G_{11}(\Theta, \varphi; t) \approx N\mu_m^2 \{ \langle \cos \Theta \rangle_K e^{-2\Gamma t} + \langle \cos \Theta \phi_{1,0}(\Theta) \rangle_K e^{-(DE_{1,0} + 2\Gamma)t} \}.$$

Az összeg további tagjai, nagyobb n -ekre elhanyagolhatók, mert $\langle \cos \Theta \phi_{n,0}(\Theta) \rangle_K$ rohamosan csökken, mivel $\phi_{n,0}(\Theta)$ gyakran vált előjelet, $\cos \Theta$ viszont közel állandó, ha Θ_0 nem túl nagy. A Laplace-transzformációt elvégezve:

$$\varepsilon^*(\omega)_{11} - \varepsilon(\infty)_{11} = \frac{N\mu_m^2}{\varepsilon_0 kT} \left\{ \frac{\langle \cos \Theta \rangle_K}{1 + \frac{i\omega}{2\Gamma}} + \frac{\langle \cos \Theta \phi_{1,0}(\Theta) \rangle_K}{1 + \frac{i\omega}{DE_{1,0} + 2\Gamma}} \right\}.$$

Merőleges orientáció

Az előzőhöz hasonlóan rögzítjük a kiindulási feltételeket:

$$\Theta(0) = \Theta_0, \quad \varphi(0) = 0.$$

Keressük a korrelációs függvényt:

$$F_{\perp}(t) = N\mu_m^2 \sin \Theta_0 \int_K ds \sin \Theta \cos \varphi G_{\perp}(\Theta, \varphi; t),$$

ahol $G \perp (\Theta, \varphi; t)$ kielégíti a következő egyenletet:

$$\frac{\partial G \perp (\Theta, \varphi; t)}{\partial t} = \Delta G \perp (\Theta, \varphi; t)$$

$$\nabla G \perp (\Theta_0, \varphi; t) = 0, \quad G \perp (\Theta, \varphi; 0) = \delta(\Theta - \Theta_0) \delta(\varphi). \quad (14b)$$

A (14b) egyenlet megoldását az előzőekben bevezetett $\phi_{n,m}$ és $E_{n,m}$ mennyiségek segítségével adjuk meg:

$$G \perp (\Theta, \varphi; t) = \sum_{n,m=0}^{\infty} \phi_{n,m}(\Theta) e^{im\varphi} e^{-DE_{n,m}t}.$$

Az $F \perp(t)$ korrelációs függvényben szereplő φ szerinti integrál valamennyi m -re nullát ad, kivéve $m=1$ esetet, tehát elégséges a $\phi_{n,1}$ és $E_{n,1}$ megoldásokkal foglalkozni.

$$F \perp(t) \approx N\mu_m^2 \sin \Theta_0 \{ \langle \phi_{0,1}(\Theta) \sin \Theta \rangle_K e^{-DE_{0,1}t} + \langle \phi_{1,1}(\Theta) \sin \Theta \rangle_K e^{-DE_{1,1}t} \}.$$

A numerikus számolás eredménye azt mutatja, hogy $\langle \phi_{0,1}(\Theta) \sin \Theta \rangle_K$ kb. egy nagyságrenddel nagyobb, mint $\langle \phi_{1,1}(\Theta) \sin \Theta \rangle_K$. Mivel $E_{0,1}$ és $E_{1,1}$ viszont közeli értékek, tehát a két folyamat frekvenciában nem szeparálható, ezért a lényegesen kisebb intenzitású második diszperziót elhanyagolhatjuk. A Laplace-transzformáció után:

$$\varepsilon^*(\omega) \perp - \varepsilon(\infty) \perp = \frac{N\mu_m^2}{\varepsilon_0 kT} \sin \Theta_0 \frac{\langle \phi_{0,1}(\Theta) \sin \Theta \rangle_K}{1 + \frac{i\omega}{DE_{0,1}}}.$$

IRODALOM

1. de Gennes, P. G., The Physics of Liquid Crystals, Clarendon Press, Oxford. 1974.
2. Чистяков, И. Г., Жидкие кристаллы, Москва. 1966.
3. Maier, W., Saupe, A., Z. Naturf., A13, 564, 1958, A14, 882, 1959.
4. de Vries, A., J. de Physique (Paris), 36, C—1, 1975.
5. Sackmann, H., Demus, D., Mol. Cryst., 2, 81, 1966.
6. Sackmann, H., Springer Series in Chemical Phys., Vol. 11, New York, 1980. p. 19.
7. Sigaud, G., Hardouin, F., Achard, M. F., Levelut, A. M.: J. Physique (France), 42, 107, 1981.
8. Cladis, P. E., Bogardus, R. K., Daniels, W. B., Taylor, G. N., Phys. Rev. Lett., 39, 720, 1977.
9. Brownsey, G. J., Leadbetter, A. J., J. de Physique Letters, 42, L135, 1981.
10. Lorentz, H. A., The theory of electrons. 1952. Dover.
11. Böttcher, C. J. F., Theory of electric polarization I—II. 1973.
12. Onsager, L., J. American Chem. Soc., 58, 1486, 1936.
13. Kubo, R., J. Phys. Soc. Japan, 6, 570, 1957.
14. Tsu-Wei Nee, Zwanzig, R., J. Chem. Phys., 52, 6353, 1970.
15. Cole, R. H., J. Chem. Phys., 42, 637, 1965.
16. Glarum, S. H., J. Chem. Phys., 33, 1371, 1960.
17. Fatuzzo, E., Mason, P. R., Proc. Phys. Soc., 90, 741, 1967.
18. Maier, W., Meier, G., Z. Naturforschung, 16a, 262, 1961.
19. Bordewijk, P., Physica, 69, 422, 1973, 75, 146, 1974.
20. Martin, A., Meier, G., Saupe, A., Symp. Faraday Soc., 5, 119, 1971.
21. Axmann, A., Z. Naturforschung, 21a, 615, 1966.
22. Gray, G. W. et al.: Electronics Lett., 9, No 6, 1973.
23. Минкин, В. И. и другие, Дипольные моменты в органической химии, Химия, 1968.
24. O'Konski, C. T., Edwards, A., Rev. Sci. Instr., 39, 1456, 1968.
25. Price, A. H., Chem. Phys. Lett., 30, 30, 1975.
26. Price, A. H., Wegdam, G. H., J. Phys. E., 10, 478, 1977.
27. Bata, L., Buka, A., Jánosy, I., KFKI—1973—32.
28. Bata, L., Buka, A., Jánosy, I., KFKI—1973—70.
29. Bata, L., Buka, A., Jánosy, I., Solid State Comm., 15, 647, 1974.
30. Deuling, H. J., Buka, A., Jánosy, I.: Journal de Physique, 37, 965, 1976.
31. Taylor T. R., Arora, S. L., Ferguson, J. Z., Phys. Rev. Lett., 25, 722, 1970.

31. Mircea-Roussel, A., Léger, L., Rondelez, F., de Jeu, W. H., J. de Physique Cl, 36, 1975, Cl—93.
32. Tsvetkov, V. N., Forschungen über Flüssige Kristalle, Halle, 1978. p. 56.
33. Hill, E. N., Vaughan, W. E., Price, A. H., Davies, M., Diel. Prop. and Molec. Behaviour., London, 1969.
34. de Vries, A., Advances in Liquid Crystal Research and Applic., Pergamon Press Akadémiai Kiadó, 1980. p. 71.
35. Engelen, B., Heppke, G., Hopf, R., Schneider, F., Ann. Phys., 3, 403, 1978.
36. Schneider, F., Sharma, N. K., Z. Naturforschung, 36a, 1086, 1981.
37. Gihman, I. I., Szkorohod, A. V., Bevezetés a sztochasztikus folyamatok elméletébe, Műszaki Könyvkiadó, Budapest 1975.
38. Венцель, А. Д., Курс теории случайных процессов, Наука, Москва, 1975.
39. McConnell, J., Rotational Brownian motion and dielectric theory, Academic Press. 1980.
40. Машикович, М. Д., Электрические свойства неорганических диэлектриков в деапазоне СВЧ, Москва, 1969.
41. Schneider, F., Sharma, N. K., Z. Naturforschung, 36a, 62, 1981.
42. de Jeu, W. H., Goossens, W. J. A., Bordewijk, P., J. Chem. Phys., 61, No 5, 1985, 1974.
43. Lee, F. T., Tan, H. T., Phys. Rev. Lett., 31, 1117, 1973.
44. Benguigui, L., Physics Lett., 66A, 383 (1978).
45. Френкель, Я. И., Кинетическая теория жидкостей, из. Наука, Ленинград, 1975.

Az értekezés témakörében megjelent publikációk

- B1. Bata, L., Buka, Á., Molnár, G., Rotary motion of molecules about their short axis by dielectric relaxation and splay viscosity measurements, Mol. Cryst. Liquid Cryst., 38, 155, 1977.
- B2. Bata, L., Buka, Á., Dielectric measurements on smectic—A and nematic phases, Acta Physica Polonica, A54, N5, 1978.
- B3. Buka, Á., Bata, L., Static dielectric permittivity measurements on aligned smectic—C phase, Mol. Cryst. Liquid Cryst. Letters, 49, N5, 1979.
- B4. Buka, Á., Owen, P. G., Price, A. H., Dielectric relaxation in nematic and isotropic phases of *n*-heptyl and *n*-heptoxy-cyanobiphenyl, Mol. Cryst. Liquid Cryst., 51, 295, 1979.
- B5. Buka, Á., Owen, P. G., Price, A. H., Dielectric relaxation in MBBA, Mol. Cryst. Liquid Cryst., 51, 295, 1979.
- B6. Buka, Á., Bata, L., Kresse, H., Reorientation of the long molecular axis in smectic phases, Report KFKI—1980—04.
- B7. Bata, L., Buka, Á., Dielectric properties of nematic and smectic—A liquid crystals. In: Advances in L' C. Research and Application, Pergamon Press/Akadémiai Kiadó, 1980.
- B8. Buka, Á., Bata, L., Dielectric permittivity and loss measurement on aligned nematic, smectic—A and smectic—C phases of DOBHO. In: Advances in L. C. Research and Application, Pergamon Press/Akadémiai Kiadó, 1980. p. 261.
- B9. Price, A. H., Buka, Á., Dielectric dispersion in nematogens. In: Advances in L. C. Research and Application, Pergamon Press/Akadémiai Kiadó, 1980. p. 267.
- B10. Bata, L., Buka, Á., Jánosy, I., Szabon, J., Investigation of the physical parameters of NPOOB around the phase transitions. In: Advances in L. C. Research and Application, Pergamon Press/Akadémiai Kiadó, 1980. p. 209.
- B11. Kresse, H., Selbmann, Ch., Demus, D., Buka, Á., Bata, L., Reorientation of the long molecular axis in smectic phases, Crystal Research and Technology, 16, N12 1981.
- B12. Bata, L., Buka, Á., Dielectric permittivity and relaxation phenomena in smectic phases, Mol. Cryst. Liquid Cryst., 63, 307, 1981.
- B13. Buka, Á., de Jeu, W. H., Diamagnetism and orientational order of nematic liquid crystals, J. de Physique (France), 43, 361, 1982.
- B14. Buka, Á., Bata, L., Pintér, K., Szabon, J., Molecular relaxation in highly ordered orthogonal smectic S_A , S_B and S_E phases, Mol. Cryst. Liquid Cryst. Lett., 72, 285, 1982.
- B15. Buka, Á., Leyvraz, F., Dielectric relaxation in polar liquid crystals, physica status solidi (b), 112, 289, 1982.
- B16. Kresse, H., Buka, Á., Dielectric behaviour of the smectic—I phase, Crystal Research and Technology, 17, 1123, 1982.
- B17. Buka, Á., Bata, L., Szabon, J., Dielectric permittivity on commensurate and incommensurate smectic phases, Mol. Cryst. Liquid Cryst. 1983.

- B18. Bata, L., Buka, Á., Szabon, J., Thermal and dielectric properties of HOPDOB, *Forschungen über Flüssige Kristalle*. Halle, 1983/41. N 12.
- B19. Kresse, H., Buka, Á., Dielektrisches Verhalten des trans-4-*n*-Octylcyclohexancarbonsäure-(4'-*n*-hexyloxyphenylesters). *Zeitschrift für Chemie*, 24, N 2, 69, 1984.
- B20. Jákli, A., Buka, Á., Rotational Brownian motion and dielectric permittivity in nematic liquid crystals. KFKI—1984—23.
- B21. Buka, Á., Bata, L., Pintér, K., Dielectric dispersion in the commensurate and incommensurate smectic phases, *Mol. Cryst. Liquid Cryst.* 1984.
- B22. Buka, Á., Price, A.H., Dielectric relaxation and order parameters in the nematic and smectic phases of 4, 4'-*n*-octylcyanobiphenyl (8CB). *Mol. Cryst. Liquid Cryst.* 1984.

SZILÁRDTESTEK ADHÉZIÓJA*

GROMA ISTVÁN

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

1. Bevezetés	449
2. Szilárdtestek érintkezése	450
2.1. Gömbök érintkezése	450
2.2. Nyomószerszám behatolása az anyagba	451
3. Az adhézió rugalmas elmélete	452
4. Kísérleti eredmények	454
5. Adhézió plasztikus deformáció esetén	456
6. A felületi érdesség hatása az adhézióra	459
7. Felületi szennyezőatomok hatása az adhézióra	462
8. Összefoglalás	465

1. BEVEZETÉS

Adhézióról akkor beszélünk, ha két érintkező test szétválasztásához valamilyen húzóerőre van szükség. A két test közötti kölcsönhatás leggyakrabban a felületi atomok van der Waals kölcsönhatásából adódik, de elképzelhető, hogy a határrétegben levő atomok között kémiai kötés is létrejön. A továbbiakban nem foglalkozunk a jelenségek mikroszkopikus leírásával. A két test határfelületén fellépő $\gamma_{1,2}$ és a testek vákuumra vonatkozó γ_1 , illetve γ_2 felületi feszültségét tekintjük alap paramétereknek. Bevezetve a $\Delta\gamma = \gamma_1 + \gamma_2 - \gamma_{1,2}$ jelölést, a két test energiájának felületi feszültségből származó megváltozása az összeérintés előtt és után $-\Delta\gamma A$, ahol A az érintkezési terület (Dupré 1869). Ennek megfelelően az adhézió szempontjából érdekes mennyiség csak a $\Delta\gamma$ lesz.

Jelen dolgozatban csak szilárd testek közötti adhézióval foglalkozunk. Ennek megfelelően a két érintkező anyag E_1 , illetve E_2 Young-modulusát és ν_1 , illetve ν_2 Poisson-számát tekintjük adotttnak.

Az adhéziós vizsgálatoknál mind kísérleti, mind pedig elméleti szempontból a két test szétválasztásához szükséges P erő, illetve az ennek megfelelő $P/A = \sigma_{\text{krit}}$ feszültség meghatározása a feladat. Azonban nem létezik egy pusztán az érintkező anyagokra jellemző σ_{krit} , mivel a σ_{krit} a felsorolt $\Delta\gamma$, E , ν mennyiségeken kívül a minták geometriájának is függvénye. Ugyanis $\sigma_{\text{krit}} = Bf(x, y, \dots)$ alakú kell legyen, ahol B feszültség dimenziójú x, y, \dots pedig dimenziótlan mennyiségek és f valamilyen függvény. Ha σ_{krit} csak a $\Delta\gamma, E, \nu$ mennyiségektől függne, akkor ezekből

* Érkezett: 1985. január 8.

kellene előállítani egy feszültség dimenziójú mennyiséget, de ez csak az E lehet; továbbá dimenziótlan x, y, \dots mennyiségeket, ilyen pedig egyedül a ν lehet, így σ_{krit} nem tartalmazza a felületi feszültségért felelős $\Delta\gamma$ -t. Ha bevezetünk valamilyen; a minták geometriájára jellemző, hosszúság dimenziójú mennyiséget, σ_{krit} előállítására sok lehetőség nyílik. Ennek megfelelően néhány kivételtől eltekintve, különböző görbületi sugarú gömbök, illetve hengerek közötti adhéziót vizsgálják.

A továbbiakban röviden összefoglalunk néhány adhéziós elméletet és kísérletet, valamint foglalkozunk a felületi érdesség és a felületi szennyezés adhézióra gyakorolt hatásával.

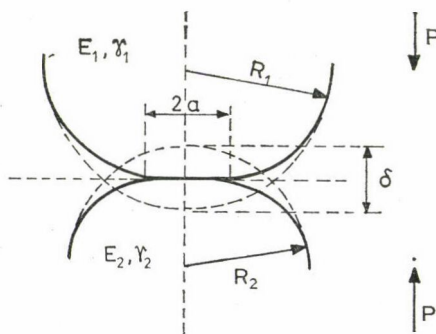
2. SZILÁRDTESTEK ÉRINTKEZÉSE

Mielőtt rátérnénk az adhéziós problémák vizsgálatára; röviden foglalkozunk kell két szilárdtest érintkezési problémájával. Két esettel foglalkozunk részletesebben. Az egyik, amikor két különböző görbületi sugarú gömböt nyomunk egymásba (*Hertz-törvény*, 1896) és amikor egy a sugarú hengert nyomunk úgy egy sík felületbe, hogy a henger tengelye merőleges legyen a síkra.

2.1. Gömbök érintkezése

Legyen az egyik gömb sugara R_1 ; a másiké R_2 és jelöljük a -val az érintkezési tartomány sugarát, P -vel pedig az alkalmazott külső nyomóerőt (1. ábra). Ekkor fennáll az

$$a^3 = \frac{3}{4} \pi (k_1 + k_2) \frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} P \quad (1)$$



1. ábra. A geometriai viszonyok két gömb összenyomásakor

összefüggés, ahol k_1 és k_2 rugalmas állandók [1]:

$$k_1 = \frac{1 - \nu_1}{\pi E_1}, \quad k_2 = \frac{1 - \nu_2}{\pi E_2}.$$

A benyomódás következtében a két gömb középpontja δ távolsággal közelebb kerül egymáshoz, amelynek nagysága:

$$\delta^3 = \frac{9}{16} \pi^2 (k_1 + k_2)^2 \frac{R_1 + R_2}{R_1 R_2} P^2. \quad (2)$$

Bevezetve az $1/R = 1/R_1 + 1/R_2$ és $K = 3/4 \pi (k_1 + k_2)$ jelölést, az alábbi egyszerű összefüggésekre jutunk:

$$a^3 = RP/K, \quad (3)$$

$$\delta = \left(\frac{RP}{K} \right)^{2/3} \frac{1}{R}. \quad (4)$$

A feszültségeloszlás az érintkezési tartományon belül

$$\sigma = \frac{3P}{2\pi a^2} \sqrt{1 - \frac{r^2}{a^2}}, \quad (5)$$

ahol r az érintkezési kör lap középpontjától mért távolság.

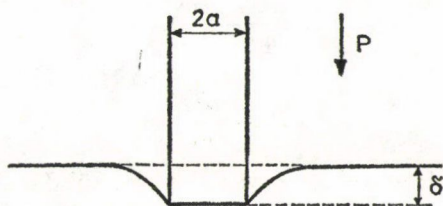
2.2. Nyomószerszám behatolása az anyagba

Abban az esetben, ha adott a sugarú hengert nyomunk merőlegesen egy végtelen kiterjedésű sík felületbe (2. ábra), a henger behatolási mélysége (δ) és a szükséges P nyomóerő között a

$$\delta = \frac{2}{3} \frac{P}{Ka} \quad (6)$$

összefüggés adódik [2]. A nyomáseloszlás pedig a henger tengelyétől mért r távolság függvényében az érintkezési síkban

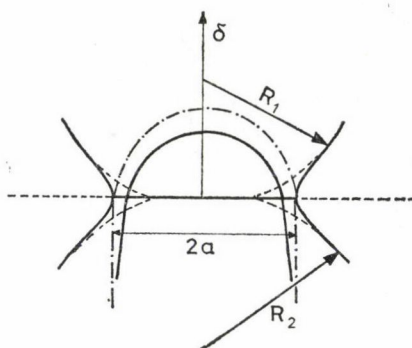
$$\sigma(r) = \frac{P}{2\pi a} \frac{1}{\sqrt{a^2 - r^2}}. \quad (7)$$



2. ábra. A geometriai viszonyok egy henger sík felületbe nyomásakor

3. AZ ADHÉZIÓ RUGALMAS ELMÉLETE

Két rugalmasan deformálódott gömb közötti adhézió leírására *Johnson és munkatársai* dolgoztak ki modellt [3]. A geometriai viszonyokat a 3. ábra szemlélteti. A betűk jelentése ugyanaz, mint az előzőekben. Feladatunk a P és a , illetve δ és a közötti összefüggés meghatározása.



3. ábra. A geometriai és nyomásviszonyok két gömb között. A nyomáseloszlás az érintkezési tartomány középpontjától mért távolság függvényében abban az esetben, ha adhézió fellép (—) abban az esetben, ha adhézió nem lép fel, csak összenyomjuk a két gömböt (---)

A rendszer teljes energiája három részből adódik:

$$U_T = U_E + U_P + U_S;$$

ahol U_E a gömbök deformációjából adódó rugalmas energia, $U_P = -P\delta$ a külső erőhöz tartozó potenciális energia és $U_S = -\Delta\gamma\pi a^2$ a felületi energia. Ha ismerjük, hogy az U_E és a δ hogyan függ a P -től és az a -tól, akkor $U_T(a, P)$ is valamilyen adott függvény. Adott P -hez tartozó a -t az tünteti ki, hogy az egyensúlyi esetben a teljes energiának minimuma van, aminek szükséges feltétele, hogy

$$\frac{dU_T}{da} = 0.$$

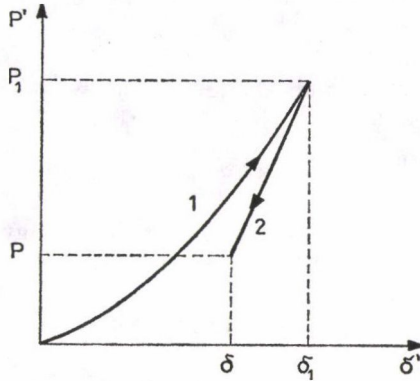
Vezessük be a

$$P_1 = \frac{a^3 K}{R}$$

jelölést. P_1 szemléletes jelentéssel bír, ugyanis ekkora külső nyomóerő kellene ahhoz, hogy a két gömb érintkezési tartományának sugara a legyen abban az esetben, ha a felületi feszültségből származó erő nem lép fel, így a rendszer követné a Hertz-törvényt.

A valóságban a felületi feszültség miatt ennél kisebb P külső erő esetén lesz a az érintkezési tartomány sugara. Feltételezhetjük, hogy ez a P úgy áll be, hogy

először a felületi erő nélkül folyamatosan összenyomjuk a gömböket addig, hogy a legyen az érintkezési tartomány sugara, ekkor δ' az aktuális összenyomódás és P' külső erő között a (4) összefüggés teremt kapcsolatot, majd a $P' = P_1$ nyomás elérésekor bekapcsoljuk a felületi erőt és ennek megfelelően a külső erőt P_1 -ről folyamatosan P -re csökkentjük, miközben a P_1 -nek megfelelő δ_1 is δ -ra csökken (4. ábra).



4. ábra. A $P'(\delta')$ összefüggés. Az 1. szakasz felel meg annak, amikor adhézió nem lép fel, a 2. szakasz mentén csökken az erő P_1 -ről P -re az adhézió bekapcsolása után

A második szakaszban a P' és δ' között semmilyen kapcsolat nem áll rendelkezésünkre. Johnson és munkatársai feltételezték, hogy ez a szakasz úgy modellezhető, mint amikor egy a sugarú hengert húzunk ki egy sík lapból, tehát P' és δ' között a (6)-nak megfelelő

$$\delta' - \delta = \frac{2}{3} \frac{P_1 - P'}{Ka}$$

lineáris kapcsolat áll fenn (természetesen itt a $\delta' = \delta_1$ -hez a $P' = P_1$ nyomóerőnek kell tartoznia). Ekkor P és P_1 , illetve a ismeretében δ meghatározható. Az

$$U_E = \int_0^P P' d\delta' = \int_0^P P' \frac{d\delta'}{dP'} dP'$$

rugalmas energia a két szakasznak megfelelően két részből tevődik össze:

$$U_E = \int_0^{P_1} P' \frac{d\delta'}{dP'} dP' + \int_{P_1}^P P' \frac{d\delta'}{dP'} dP'$$

miközben a változik
(a $P'(\delta')$ görbe 1. szakasza)

miközben $a = \text{áll.}$
(a $P'(\delta')$ görbe 2. szakasza)

Ekkor az U_T -t fel tudjuk írni P és a függvényében. Elvégezve a kijelölt műveleteket

és a szélsőérték-keresést, adódik, hogy

$$a^3 = \frac{R}{K} (P + 3\Delta\gamma\pi R + \sqrt{6\Delta\gamma RP + (3\Delta\gamma\pi R)^2}). \quad (7)$$

Ha $\Delta\gamma = 0$ (7)-ből visszkapjuk az egyszerű Hertz-egyenletet.

Ha a külső erő $P = 0$, akkor az érintkezési tartomány sugara

$$a^3 = 6\pi\Delta\gamma R^2/K \neq 0.$$

Különösen fontos az az eset, amikor P negatív, tehát húzó igénybevételnek vetjük alá a rendszert. Ha a

$$P < -\frac{3}{2} \Delta\gamma\pi R,$$

akkor a (7) kifejezésben a gyök alatt negatív szám áll, így a nem lesz valós szám. Ezért fizikailag értelmes megoldást csak akkor kapunk, ha

$$P \geq -\frac{3}{2} \Delta\gamma\pi R. \quad (8)$$

Az egyenlőséghez tartozó P_{krit} kritikus értéknél a két gömb szétszakad. Ennek a P_{krit} értéknek a meghatározása volt a feladatunk. Érdeemes megjegyezni, hogy P_{krit} független az érintkező gömbök rugalmas állandóitól.

A $P = 0$ esetben a nyomáeloszlást is könnyű meghatározni (5) és (7) felhasználásával [4], hiszen ez nyilván (5) és (7) $P = P_1$ helyen felvett értékek különbsége. Ekkor (3) figyelembevételével

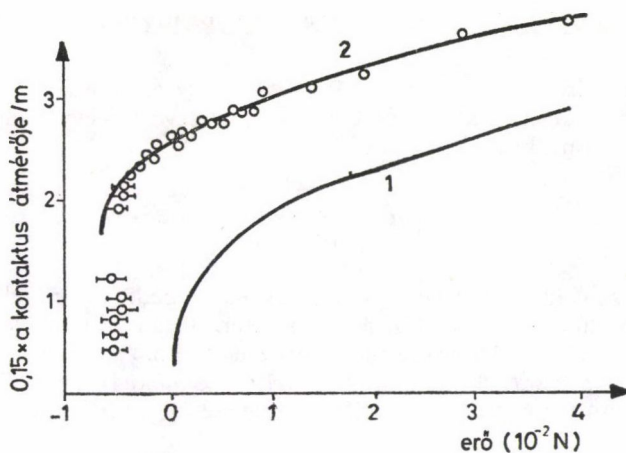
$$\sigma(r) = \frac{K}{R} \frac{a}{\pi} \frac{\left(2 - 3 \frac{r^2}{a^2}\right)}{\sqrt{1 - \frac{r^2}{a^2}}}.$$

A kialakult nyomáeloszlást a 3. ábra szemlélteti.

4. KÍSÉRLETI EREDMÉNYEK

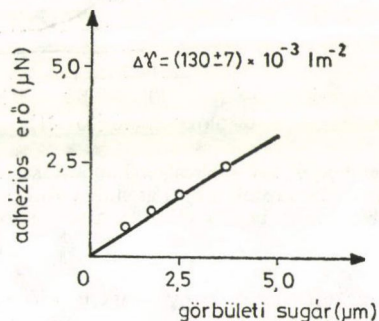
Johnson és munkatársai vizsgálták két gumi gömb adhézióját. Felvették a P és a közötti kapcsolatot. Az eredményeket az 5. ábra szemlélteti. Mivel $\Delta\gamma$ ismeretlen, a mérési eredmények elmélettel való összehasonlítása csak úgy lehetséges, ha a (7) összefüggés felhasználásával $\Delta\gamma$ -t illesztéssel meghatározzuk. Megállapíthatjuk, hogy az illesztés után adódó $P(a)$ görbe az egész mérési tartományban jól illeszkedik a mérési pontokra. A mérési eredmények jól mutatják a Hertz-elmélettől való lényeges eltérést is.

Kendall egy kemény sík lapra rakott vékony rugalmas anyag és egy szintén kemény anyagból készült henger, illetve gömb közötti adhéziót vizsgálta [5]. Az eredmények jól mutatják, hogy az adhézió erősen függ a felületi energián kívül a geometriai viszonyoktól és a testek rugalmas tulajdonságaitól is.



5. ábra. Gumi gömbök ($R=2,2$ cm) esetén az érintkezési tartomány sugara kis pozitív és negatív erők esetén. 0: kísérleti eredmények; 1) görbe: Hertz-elmélet, 2) görbe: Johnson-féle módosított elmélet

Az eddig említett vizsgálatok mindegyike olyan nemfémes anyagokra vonatkozott, amelyeknek kicsi a Young-modulusa. Kemény anyagok között a nagy rugalmas energia miatt az adhézió nehezebben figyelhető meg. Kohno és Hyodo [6] egy nagyon hegyes volfrám tű (a hegy görbületi sugara $10\text{--}50\text{ }\mu\text{m}$) és egy acél lap közötti adhéziót vizsgálta. Megmutatták, hogy (8)-nak megfelelően P_{krit} arányos az R görbületi sugárral (6. ábra). Az arányossági tényezőtől $\Delta\gamma$ is meghatározható. A mérés elvégzése elég nehéz feladat, mert a fellépő erők μN nagyságrendűek.



6. ábra. Az adhéziós erő függése a görbületi sugártól egy sík acél lap és egy volfrám tű esetén.

Megemlítjük még Eastenling és Thölén [7] vizsgálatait, amelyek módszerükben lényegesen különbözik az eddigiektől. A szerzők $0,1\text{ }\mu\text{m}$ nagyságrendű fémrészecskék közötti adhézió esetén elektronmikroszkóppal vizsgálták az adhézió következtében kialakuló feszültségviszonyokat.

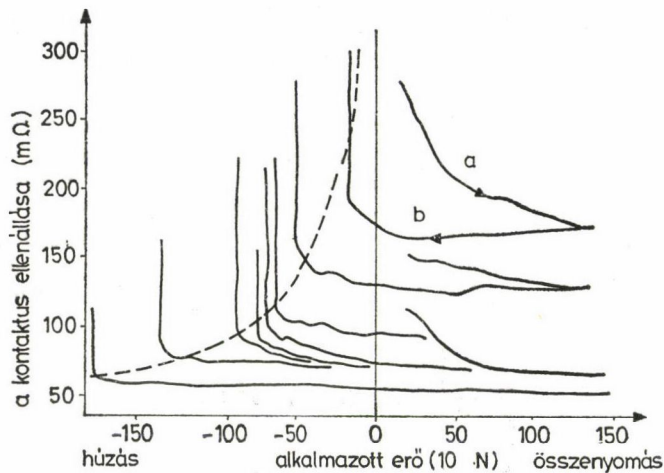
5. ADHÉZIÓ PLASZTIKUS DEFORMÁCIÓ ESETÉN

Ha két fém közötti adhéziót vizsgálunk, akkor az érintkezési tartomány sugara ellenállásmérésből határozható meg. Ugyanis ha két vezető egy a sugarú kör mentén érintkezik, a kontaktus ellenállása [8]:

$$R = \frac{\rho_c}{4a} + \frac{\rho_s}{\pi a^2}, \quad (9)$$

ahol ρ_c a két vezető fajlagos ellenállásának összege ρ_s pedig az ún. felületi ellenállás, amely egy kísérletileg meghatározandó paraméter. Tehát mérve a kontaktus ellenállását (9) felhasználásával következtethetünk a értékére.

Gane és munkatársai [9], valamint Hartweck és Grabke [10] mérték két egymásra merőlegesen állított henger ellenállásának függését a terheléstől. Tipikus mérési eredmények láthatók a 7. ábrán.



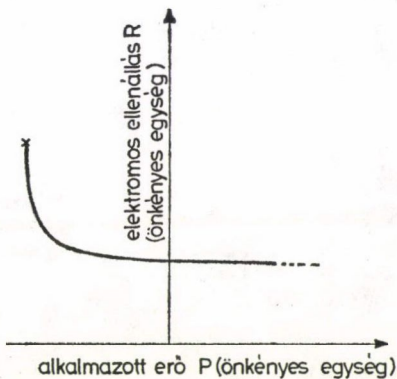
7. ábra. $R(P)$ grafikonok két acélhenger kontaktusa esetén. A a) szakaszt az első terheléskor kapjuk a b)-t, amikor csökkentjük a terhelést. A folytonos görbénél az a_f értéke változik. A szaggatott vonal, a (14)-nek megfelelő görbe

A görbék feltűnő jellegzetessége, hogy amikor először 0-ról kezdjük növelni a terhelést, a görbe a) szakaszát kapjuk, majd csökkentve a terhelést a b) görbe mentén jutunk vissza $P=0$ -hoz és csak negatív terhelés alkalmazása esetén szűnik meg a kontaktus, ekkor a görbe függőlegessé válik. Tehát kezdetben adhézió nem figyelhető meg, az első összenyomás után azonban már jelentkeznek. A második szakasz mindegyik görbén gyakorlatilag vízszintes, tehát az ellenállás nem vagy alig függ a terheléstől.

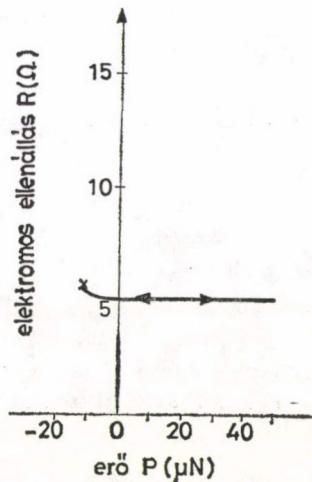
Az adhézió Johnson-féle elmélete ezekre a jelenségekre nem alkalmazható, egyrészt a jelentkező irreverzibilitás miatt, amelyről minden szerző azt állítja, hogy plasztikus deformáció következménye. Másrészt ha ρ_s kicsi akkor (9)-ben eltekintünk

a második tagtól, és feltételezzük, hogy a rendszer követi a (7) törvényt, akkor az $R(P)$ összefüggésnek a 8. ábra szerint kellene változnia. (Mivel (9)-ben q_c valamilyen anyagi minőségtől függő érték, az ábrán egységeket nem tüntettünk fel.) Látható, hogy a $P=0$ -tól P_{krit} felé haladva az ellenállás 2–3-szorosára nő, míg a fenti mérésekben R kevesebb mint 10%-ot változik. A jelenség magyarázatára eddig kielégítő elmélet nem született.

Némiképp egyszerűbb a helyzet abban az esetben, ha nem két henger, hanem egy nagyon hegyes fémtű és egy fémsík közötti adhéziót vizsgáljuk. Pollock és munkatársai [11] 9. ábrán látható mérési eredményei azt mutatják, hogy az előzőekben említett irreverzibilitás itt nem lép fel, de R itt is gyakorlatilag független a P külső terheléstől.



8. ábra. Az $R(P)$ függvény abban az esetben, ha a rendszer követi a Johnson-elméletet



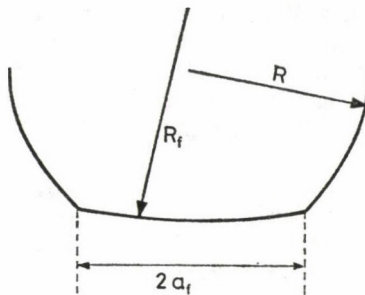
9. ábra. $R(P)$ függvény egy volfrám fólia és egy platinatű ($R=0,3 \mu\text{m}$) közötti adhézió esetén

A jelenség értelmezésére Pollock [12] feltételezi, hogy már a $P=0$ -hoz tartozó kezdeti kontaktusnál a minta plasztikus deformációt szenved, így a maradandó alakváltozás következtében egészen mások a geometriai viszonyok, mint amit Johnson és munkatársai feltételeztek. Ezen kezdeti plasztikus deformáció után a külső húzóerő hatására létrejövő deformáció már rugalmas lesz. Ekkor lehetőség nyílik az adhéziós erő kiszámítására.

Tételezzük fel ugyanis, hogy a kezdetben R sugarú gömb alakú mintának (a másik mintát síknak tekintjük) plasztikus deformáció következtében az $r < a_f$ tartományban $R_f > R$ -re változik a görbületi sugara, amint ez a 10. ábrán látható.

Ha először eltekintünk az adhéziótól és egyszerűen a rugalmas $P(a)$ összefüggést keressük, akkor ez az $a > a_f$ esetén a megváltozott geometria miatt eltér a Hertz-féle összefüggéstől. Bevezetve a

$$P_f = \frac{Ka_f^3}{R_f}$$



10. ábra. Egy gömb plasztikus deformációja következtében kialakult geometriai viszonyok

jelölést, P_f annak a külső erőnek felel meg, amikor $a = a_f$. $P > P_f$ esetén Pollack kísérleti vizsgálatok segítségével állapította meg a $P(a)$ összefüggést. Bevezetve a

$$\beta = \frac{a - a_f}{a_f}$$

jelölést, a $0 < \beta \ll 1$ esetében azt találta, hogy

$$\beta \approx \varrho [R(P - P_f)/Ka_f^3]^\eta \quad (10)$$

alakú, ahol ϱ és η állandók (a mérések szerint $\varrho = 0,142$, $\eta = 1,43$).

A δ és P közötti összefüggésre a (6)-ból származtatható

$$\frac{d\delta}{dP} = \frac{2}{3Ka} \quad (11)$$

egyenletet használta fel.

Az adhézió jelenlétét ugyanúgy vette figyelembe, mint Johnson és munkatársai. Kereste az U_T teljes energia a szerinti szélsőértékét, feltételezve, hogy az $a \cong a_f$ feltétel minden külső erő esetén teljesül.

Az U_E rugalmas energia itt is két, a 3. ábrának megfelelő tagból tehető össze, azzal a különbséggel, hogy az a) szakaszban (4) helyett a (10) és (11)-ből származtatható $\delta'(P')$ összefüggést kell használni.

A második b) szakaszra Pollock is a (6)-nak megfelelően lineáris összefüggést használta. Elvégezve a számolást az

$$\frac{a - a_f}{a_f} = \varrho [R(P_1 - P)/Ka_f^3]^\eta$$

összefüggéssel definiált P_1 -re a

$$P_1^2 - 6\pi\varrho\Delta\gamma R \left[\frac{R(P_1 - P_f)}{Ka_f^3} \right]^{\eta-1} (P_1 - P_f) - 2PP_1 + (P^2 - 6\pi\Delta\gamma Ka_f^3) = 0 \quad (12)$$

egyenlet adódik.

Pollock és munkatársai által végzett kísérletekben (12)-ben a második tag a többinek mintegy 3%-a, így elhanyagolható. Ezután

$$P_1 = P + (6\pi\Delta\gamma Ka_f^3)^{1/2}. \quad (13)$$

Feltételezve, hogy a minták szétválásakor $a = a_f$, így $P_1 = P_f$. Ekkor a maximálisan alkalmazható húzóerőre a

$$-P_{\text{krit}} = (6\pi\Delta\gamma Ka_f^3)^{1/2} - P_f \quad (14)$$

kifejezés adódik.

Végezetül megemlítjük, hogy a (13) összefüggésnek megfelelő $R(P)$ gömbével értelmezhető a 9. ábrán látható kísérleti eredmény. Továbbá a 7. ábrán szaggatott vonallal feltüntetett a (14)-nek megfelelő $R(P_{\text{krit}})$ gömbét. Látható, hogy különböző a_f -nek megfelelő P_{krit} értékekhez tartozó ellenállásértékek jó egyezést mutatnak az elméleti görbével. A b) szakaszban Pollock elmélete helyesen írja le az adhéziós viselkedést az irreverzibilitás esetén is.

6. A FELÜLETI ÉRDESSÉG HATÁSA AZ ADHÉZIÓRA

Már a bevezetőben rámutattunk, hogy az adhéziós erő jelentősen függ a geometriai viszonyoktól. A gyakorlatban előforduló esetekben a felületek alakja többnyire nem jól meghatározott (pl. nem gömb vagy sík), hanem a felület érdes, tehát csak azt tudjuk megmondani, hogy az adott helyen mekkora valószínűséggel találunk adott geometriájú kis felületdarabot. Ekkor az adhéziós erő nyilván az adott geometriához tartozó erő várható értéke lesz.

Fuller és D. Tabor [13] abban a leegyszerűsített esetben vizsgálták az adhéziót, amikor az egyik test egy tökéletesen sík lap, a másik pedig egy olyan sík lap, amelyből R sugarú „hegyek” állnak ki különböző magasságban.

Feltételezték, hogy annak valószínűsége, hogy egy hegy magassága z és $z+dz$ közé essen a

$$\varphi(z)dz = \frac{1}{\sigma(2\pi)^{1/2}} \exp\left(-\frac{z^2}{2\sigma^2}\right) dz$$

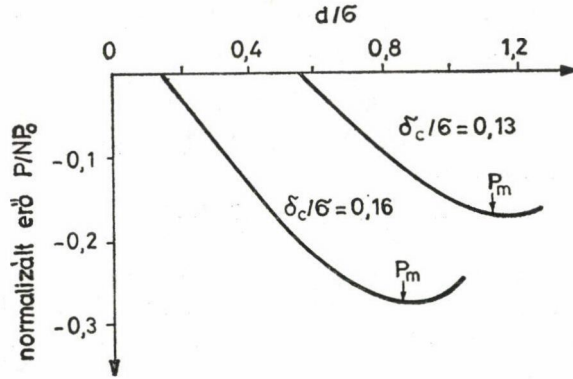
Gauss-eloszlást követi. Az egész felületből álljon ki N számú hegy. Egy adott hegy és a sík közötti erő nagyságának meghatározásához az adhézió Johnson-féle rugalmas elméletét használták fel.

Ha a két sík távolsága d , akkor egy kezdetben $z \geq d$ magasságú hegy $\delta = z - d$ mértékben nyomódik össze. Az ehhez szükséges P erő a (7) összefüggés és a 4. ábráról leolvasható $\delta(P, a)$ összefüggés felhasználásával a

$$\frac{\delta}{\delta_c} = (3x-1) \left\{ \frac{1}{9} (x+1) \right\}^{1/3}$$

egyenletnek tesz eleget, ahol $x = \left(\frac{P}{P_{\text{krit}}} + 1 \right)^{1/2}$ és

$$\delta_c = \frac{1}{3R} \left(\frac{3RP_{\text{krit}}}{K} \right)^{2/3} P_{\text{krit}} = \frac{3}{2} \pi R \Delta \gamma.$$



11. ábra. A P/NP_{krit} normalizált húzóerő függése a d/σ -tól, különböző δ_c/σ paraméterértékek esetén

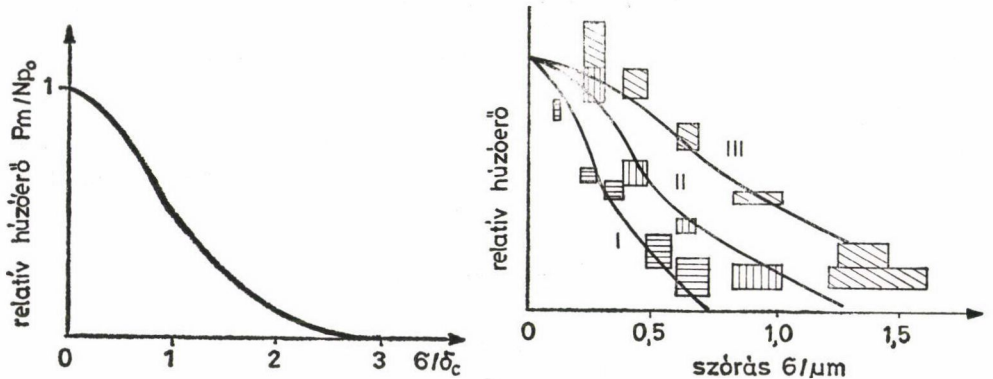
Ezekből

$$\frac{P}{P_{krit}} = F\left(\frac{\delta}{\delta_c}\right),$$

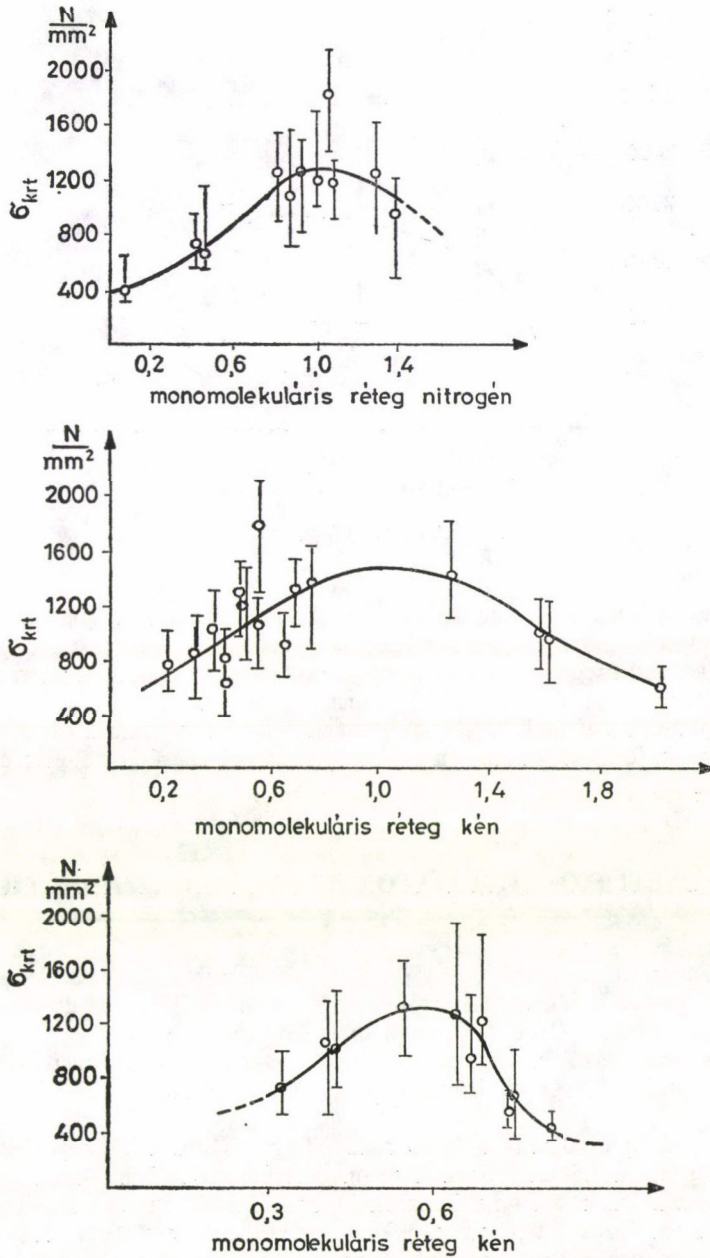
ahol az $F(x)$ függvény numerikusan határozható meg. Ezután a két sík egymástól d távolságban tartásához szükséges erő

$$\bar{P} = N \int_d^{\infty} P(z-d) \varphi(z) dz.$$

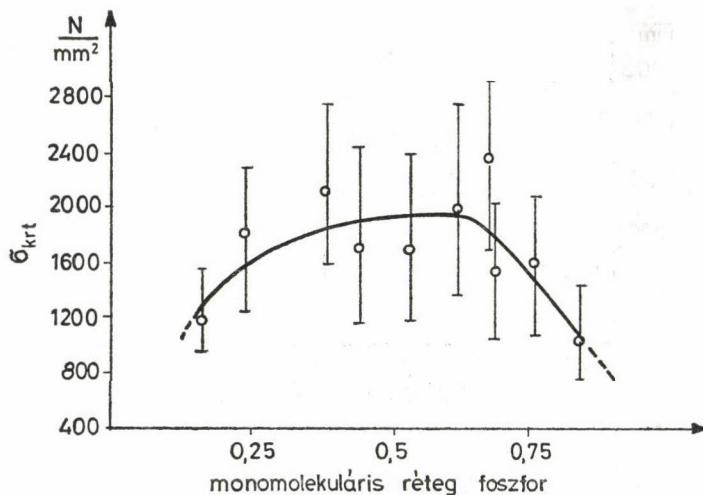
Ez szintén numerikus módszerekkel határozható meg. A $\bar{P}(d/\sigma)$ görbék különböző δ_c/σ értékek esetén a 11. ábrán láthatók. A görbék minimumához tartozó P_m külső erő értékek felelnek meg a szétszakadáshoz szükséges erőnek. A P_m a σ/δ_c függvényében a 12a ábrán látható.



12. ábra. a) A kritikus relatív P_m/NP_{krit} húzóerő függése a σ/δ_c relatív szórástól. b) Relatív adhéziós erő a σ szórás függvényében egy gumi gömb és egy sík Perspex-felület esetén. Az I $2.4 \times 10^6 \text{ Nm}^{-2}$; a II $6.8 \times 10^6 \text{ Nm}^{-2}$; a III $2.2 \times 10^6 \text{ Nm}^{-2}$ -es Young-modulushoz tartozó görbe



13. ábra. A σ_{krt} adhéziós feszültség a felületi szennyezés függvényében két acél henger közötti adhézió esetén. a) A felületi szennyezés nitrogén, b) szén, c) kén,



13. ábra. d) foszfor

A szerzők kísérleti eredményei a 12b ábrán láthatók. A görbék különböző Young-modulusok esetén a P_m és a σ közötti összefüggést mutatják.

A 12a ábrának megfelelő relatív egységeket használva a szerzők szerint a mérési eredmények jó egyezést mutatnak a 12a elméleti görbével.

Összefoglalva megállapíthatjuk, hogy mind a kísérletek, mind az elméleti eredmények szerint a felületből kiálló hegyek nagyságának szórását növelve az adhézió erőssége csökken.

7. FELÜLETI SZENNYEZŐATOMOK HATÁSA AZ ADHÉZIÓRA

Hartweck és Grabke [10] azt vizsgálta, hogy az adhézió erősségét a felületi szennyezőatomok hogyan befolyásolják. Nagy vákuumban két vas henger közötti adhéziós erőt mértek a felületre felvitt nagyon kis mennyiségű (kevesebb mint néhány monomolekuláris réteg) C, N, S, P szennyezés függvényében.

A szennyezés mértékét Auger-spektroszkópiával határozták meg egy olyan berendezésben, ahol az Auger-spektroszkóp egybe volt építve az adhéziós erőt mérő eszközzel.

Néhány mérési eredmény látható a 13. ábrán. Mind a négy görbének közös sajátága, hogy az adhéziós erőnek a szennyezés függvényében maximuma van az egy monomolekuláris réteg körüli tartományban. Ez ellentmond a várakozásnak, miszerint a szennyezés általában csökkenti az adhézió erősségét. Ezen mérések szerint ez csak bizonyos szennyezésen túl igaz.

Megállapíthatjuk, hogy a fenti mérések az eddigiekhez képest jelentősen új adalékot szolgáltatnak az adhézió teljes leírásához.

8. ÖSSZEFOGLALÁS

Az adhéziós jelenségeket két alapvetően különböző osztályba sorolhatjuk. Az egyik gyenge vagy rugalmas adhézió, amikor az anyagok mechanikai deformációi nem haladják meg a folyáshatár, a másik az, amikor plasztikus deformációt szenvednek. Mind a két esetben a kísérleti tapasztalatokkal elég jó egyezést mutató elmélet áll rendelkezésre.

A felületi érdesség hatása az adhézióra szintén modellezhető. Továbbá, ha a felületi szennyezés mértéke nem haladja meg az egy monomolekuláris réteget, a szennyezés növelheti az adhézió erősségét.

IRODALOM

1. *L. D. Landau., E. M. Lifsic*, Elméleti fizika, VII. Tankönyvkiadó, Budapest, 1974. 47.
2. *P. Frank, R. Mises*, A mechanika és fizika differenciál- és integrálegyenletei, II. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1967. p. 347.
3. *K. L. Johnson, K. Kendall and A. B. Robert*, Proc. Roy. Soc. Lond., *A* 324. 301, 1971.
4. *K. L. Johnson*, Brit. J. Appl. Phys. **9**, 199, 1958.
5. *K. Kendall*, J. Phys. D: Appl. Phys. **4**, 1186, 1971.
6. *A. Kohno, S. Hyodo*, J. Phys. D: Appl. Phys. **7**, 1243, 1974.
7. *K. E. Easterling and A. R. Thölén*, Acta Met., **20**, 1001, 1972.
8. *R. Holm*, Electrical Contact Handbook, Springer, Berlin, 1968.
9. *N. Gane, P. F. Pfaelner and D. Tabor*, Proc. Roy. Soc. Lond. *A* 340. 495, 1974.
10. *W. G. Hartweck and H. J. Grabke*, Acta Met., **29**, 1237, 1981.
11. *H. M. Pollock, P. Shuffleston and I. Shinner*, J. Phys. D: Appl. Phys., **10**, 127, 1977.
12. *H. M. Pollock*, J. Phys. D: Appl. Phys., **11**, 39, 1978.
13. *K. N. G. Fuller and D. Tabor*, Proc. Roy. Soc. Lond., *A* 345. 327, 1975.

MOZGÓ DISZLOKÁCIÓK ÉS PONTHIBÁK KÖLCÖNHATÁSA EGYSZERŰ IONKRISTÁLYOKBAN I.*

Irodalmi áttekintés

TÓTH ANDRÁS

Budapesti Műszaki Egyetem Fizikai Intézet
Kísérleti Fizika Tanszék, 1521 Budapest

TARTALOM

Bevezetés és célkitűzések	465
1. Az ionkristályok plasztikus deformációját kísérő elektromos effektusok	467
1.1. A Sztjepanov-effektus és a diszlokációk elektromos töltése	468
1.2. A diszlokációtöltés mérése és a mérésekből levonható következtetések	469
1.3. A diszlokációtöltés elméleti leírása	477
1.4. A Gyulai—Hartly-effektus mérése és értelmezései	478
1.5. A diszlokáció—vakancia-kölcsönhatás számítása alkáli halogenidekben	481
2. Kétvegyértékű kation szennyezők folyáshatár-jároléka alkáli halogenidekben	483
2.1. A folyáshatár-járolék eredete és meghatározása	483
2.2. Mozgásképtelen szennyező—vakancia-párok kritikus csúszatófeszültség-jároléka	485
2.3. Forgásképes szennyező—vakancia-párok kritikus csúszatófeszültség-jároléka	490
2.4. Kísérleti eredmények	493
Irodalom	496

BEVEZETÉS ÉS CÉLKITŰZÉSEK

A kristályos anyagok plasztikus alakváltozásában alapvető szerepet játszik a diszlokációk mozgása. Emiatt ennek a gyakorlati szempontból is fontos folyamatnak a megértése elképzelhetetlen a diszlokációk mozgásával összefüggő, azt befolyásoló jelenségek tanulmányozása nélkül. Ezek a jelenségek igen sokrétűek és bonyolultak. A kristályrács tulajdonságain kívül a diszlokáció mozgására befolyást gyakorolnak a különféle kristályhibák, így a többi diszlokáció, a szennyező atomok, illetve a belőlük létrejövő kiválások, a vakanciák, rácsközi atomok; blokk- és szemcsehatárok. A képet bonyolítja, hogy ezeknek a befolyásoló tényezőknek a hatása függ a hőmérséklettől, a kristály előéletétől, sőt a deformáció módjától is. E folyamatok feltárásának elengedhetetlen lépcsőfoka, hogy az egyes részjelenségeket megpróbáljuk a többitől elkülönítve tanulmányozni. Munkámban egy — a diszlokációk mozgásával kapcsolatos — speciális részterületen végzett kutatások eredményeit foglalom össze. A diszlokációk mozgását befolyásoló sokféle hatás közül csupán egyet, a ponthibákkal való kölcsönhatást vizsgálom, s modellanyagként egyszerű ionkristályok, az alkáli halogenidek szolgálnak.

* Érkezett: 1984. május 28. Kandidátusi értekezés. Megvédve: 1985. április 24.

Az ionkristályok plasztikus deformációjának vizsgálata igen hosszú múltra tekint vissza (*Reusch* 1867, *Mügge* 1889), s — annak ellenére, hogy e kristályok gyakorlati jelentősége jóval kisebb, mint a fémeké — a kutatás ezen a területen jelenleg is folyik (a legutóbbi összefoglaló munkát *Sprackling* írta 1976-ban). Munkahelyemen, a Budapesti Műszaki Egyetem Fizikai Intézetének Kísérleti Fizika Tanszékén az ionkristályok kutatása hagyományosan folyó tevékenység, amelyet e terület egyik úttörője, Tanszékünk egykori professzora, *Gyulai Zoltán* indított el. Munkám egy része szorosan kapcsolódik az irodalomba Gyulai—Hartly-effektus néven bevonult (*Gyulai és Hartly* 1928), általa felfedezett jelenséghez. Ez a felfedezés alapvető szerepet játszott a kristályhibák kutatásában, hiszen a mai szóhasználatnál vakanciáknak nevezett kristályhibák létezésére vonatkozó korabeli feltevéseknek első kísérleti alátámasztását adta. De a jelenség felfedezése — közvetlen tudománytörténeti jelentőségén túlmenően — napjainkig nyúló, igen széles körű kutatásokat indított el. Ennek egyik példája, hogy a Gyulai—Hartly-effektus vizsgálata vezetett az általam is tanulmányozott másik jelenség, a Sztjepanov-effektus felfedezéséhez is.

A *Gyulai Zoltán* által Tanszékünkön elindított kutatás — a hagyományoknak megfelelően — mindig kísérleti jellegű volt, s csak az utóbbi évtizedben vált szükségessé és lehetségessé, hogy a vizsgált jelenségek elméleti leírására is kísérletet tegyünk. Munkám, amely kísérleti és elméleti eredményeket egyaránt tartalmaz, ennek a törekvésnek a jegyében született.

Három régóta ismert, de nem kielégítően értelmezett jelisséggel foglalkozom. Az egyik az ún. Sztjepanov-effektus, amelynek lényege az, hogy az ionkristályok inhomogén plasztikus deformációja során a kristályban elektromos potenciálkülönbségek jelennek meg. A másik a Gyulai—Hartly-effektus, amely nem más, mint a plasztikus deformáció hatására bekövetkező drasztikus ionvezetőképességváltozás. Végül a harmadik az alkáli halogenid kristályokba bevitt kétvegyértékű kation szennyezők folyáshatár-növelő hatása. A három látszólag igen különböző jelenséget az kapcsolja össze, hogy mindháromban alapvető szerepet játszik a diszlokációk és ponthibák (az első két esetben diszlokációk és vakanciák, a harmadikban diszlokációk és szennyező—vakancia-párok) kölcsönhatása.

A Sztjepanov-effektussal és a Gyulai—Hartly-effektussal kapcsolatos vizsgálataim célja az volt, hogy a diszlokációk és kation vakanciák kölcsönhatásának az effektusokban játszott szerepét tisztázzam. Ennek érdekében kísérletileg megvizsgáltam a Sztjepanov-effektusnak a kristályban lévő kation vakanciák mennyiségétől való függését (3.1 pont). A kapott eredményeket és a fontosabb irodalmi tapasztalatokat egy — a diszlokációk és kation vakanciák kölcsönhatásán alapuló — modell segítségével értelmezem (3.2 pont). A Gyulai—Hartly-effektus mérése során egy új kísérleti eljárással megvizsgálom a jelenség magyarázatára Whitworth által kidolgozott (a diszlokáció—kationvakancia-kölcsönhatáson alapuló) modell bizonyos következtetéseinek helyességét (3.1 pont).

A kétvegyértékű kation szennyezők folyáshatár-növelő hatásával kapcsolatban célom a szennyező—vakancia-párok és diszlokációk kölcsönhatásából származó folyáshatár-járlék meghatározása volt. Ennek érdekében különböző típusú kétvegyértékű kation szennyezőt tartalmazó kristályokban a feszültségrelaxáció módszerét használva megmértem a folyáshatár-járléknek a szennyező ion típusától való függését (4.1 pont). Ezenkívül továbbfejleszttem a folyáshatár-járlék számítására szolgáló elméletet: egyrészt atomisztikus modell segítségével kiszámítom a szennyező—vakancia-párt jellemző dilatációs tenzort különböző típusú szennyezők esetén

(4.2 pont), másrészt a diszlokációval kölcsönhatásban álló különböző „erősségű” szennyező—vakancia-párok együttes hatását elméletileg megalapozott összegzési módszerrel határozom meg (4.2 pont). Végül a fenti eredmények és a forgásképes szennyező—vakancia-párok folyáshatár-járulékának számítására kidolgozott szimulációs módszer felhasználásával saját és az irodalomból vett mérési eredményeket elméletileg értelmezem (4.2 pont).

Méréseimet kontrollált szennyezéstartalmú, OH^- -mentes kristályokon végeztem (3.121 pont), aminek jelentősége jól lemérhető azokon az új megállapításokon, amelyeket ilyen kristályok segítségével kaptak (*Tarján* 1977).

Eredményeim részletes ismertetése előtt összefoglalom munkám irodalmi előzményeit (I. rész), amelyek célkitűzéseim kiindulópontjaként szolgáltak.

A dolgozatban tárgyalt problémák irodalma rendkívül szerteágazó, ami egyfajta szelektálást tesz szükségessé. Ennek fő szempontja az, hogy csupán az általam vizsgált jelenségekkel szorosan összefüggő eredményekre térek ki, és a kutatásnak azt az állapotát vázolom fel, amihez a saját eredményeim csatlakoznak. A tárgyhoz kapcsolódó — itt nem részletezett — ismeretek és eredmények összefoglaló munkákban megtalálhatók. Így az ionkristályok hibaszerkezetével kapcsolatban *Lidiard* (1957), *Barr és Lidiard* (1970), illetve *Sprackling* (1976) munkája, az ionkristályok plasztikus deformációját kísérő elektromos effektusokkal kapcsolatban *Uruszovszkaja* (1968), *Whitworth* (1975) és *Janszky* (1978) munkája, az ionkristályok plasztikus deformációjával és a szennyezések folyáshatár növelő szerepével kapcsolatban *Sprackling* (1976) már említett munkáján kívül *Mitchell és Heuer* (1977) munkája, a diszlokáció—ponttíba-kölcsönhatás és az ebből származó folyáshatár-növekmény leírásának részleteit illetően pedig *Kocks és munkatársai* (1975), illetve *Ungár és Honyek* (1981) munkája ad bővebb tájékoztatást.

A fent említett okok miatt az irodalmi áttekintésből számos — az általam tárgyalt témakörökkel kevésbé szoros kapcsolatban álló — jelentős eredmény kimaradt. Ezek közül szeretném itt kiemelni azokat a töltött diszlokációk és F -centrumok kölcsönhatásával kapcsolatos, nemzetközileg elismert eredményeket, amelyek hazai kutatók (*Turchányi és munkatársai* 1968, 1970, 1972, 1973, 1977, *Turchányi és Tarján* 1970) nevéhez fűződnek.

1. AZ IONKRISTÁLYOK PLASZTIKUS DEFORMÁCIÓJÁT KÍSÉRŐ ELEKTROMOS EFFEKTUSOK

Az ionkristályoknak az a sajátossága, hogy elektromos töltéssel rendelkező ionokból épülnek fel számos jellegzetes elektromos effektust eredményez. Ezek közül itt a két legrégebben felfedezett jelenséget, az ún. Sztyepanov-effektust és a Gyulai—Hartly-effektust tárgyalom.

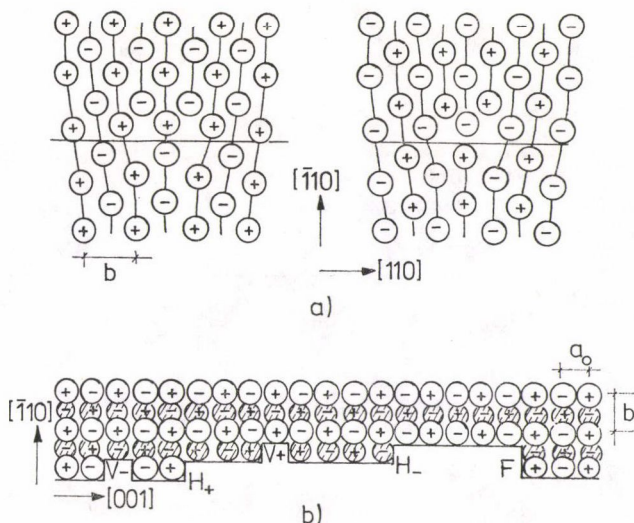
1.1. A Sztyepanov-effektus és a diszlokációk elektromos töltése

Sztyepanov¹ (1933) kőso plasztikus deformációja közben megfigyelte, hogy amíg a deformáció tartott, addig a kristályra helyezett két elektródához csatlakozó külső áramkörben áram folyt akkor is, ha a körben nem volt feszültségforrás. A kristályban végbemenő folyamatok tehát az elektródák között feszültséget hoztak létre. A jelenség azután hosszú időre feledésbe merült, s csak Fischbach és Nowick (1955) munkája nyomán vált újra ismertté az irodalomban. Fischbach és Nowick szerint a potenciálkülönbség oka az, hogy az alkáli halogenidekben a diszlokációk elektromosan töltöttek, és az effektust a töltött diszlokációk elmozdulása okozza. Ez a feltételezés Seitz (1951) munkáján alapult, aki kimutatta, hogy az $\{110\}$ síkokon mozgó éldiszlokációkon bizonyos lépcsők töltöttek lehetnek. Ez az elképzelés alapvetően helyesnek bizonyult, bár a későbbiek során számos probléma (pl. a töltés keletkezési mechanizmusa, mozgása a diszlokációval stb.) merült fel vele kapcsolatban.

A diszlokációkon elhelyezkedő töltés geometriailag lehetséges eseteit Brantley és Bauer (1966), valamint Hirth és Lothe (1968) elemezte. Megállapították, hogy mind az él-, mind pedig a csavardiszlokációk lehetnek töltöttek. A töltés lépcsőkön vagy a felületre történő kibukkanásnál, illetve csavardiszlokációk esetében ezeken a helyeken kívül kihajlásokon (angolul: kink) helyezkedik el. Mivel munkám során mozgó diszlokációk által szállított töltésekkel foglalkoztam, s Whitworth (1965, 1975) elemzése szerint eredő töltéstranszportot csak éldiszlokációk mozgása eredményezhet, ebben a fejezetben csak az éldiszlokációkat tárgyalom.

A diszlokációtöltés megértése szempontjából nagyon fontosak azok az atomisztikus számítások, amelyek tisztázták az éldiszlokáció körül kialakult ionelrendeződést. Az első ilyen számítást NaCl-ban Huntington és munkatársai (1955) végezték, s bár a későbbi számítások (Granzer és munkatársai 1968, Puls és So 1980, Bucher 1982) sok tekintetben (pl. magenergia, Peierls-feszültség) ettől és egymástól is igen különböző eredményeket adtak, az ionelrendeződés jellege mindenütt azonos. Az 1.1.a ábrán bemutatom az ionok elhelyezkedésének sémáját egy éldiszlokáció körül a diszlokációra merőleges két szomszédos (001) síkban. Az ábrán jól látható, hogy NaCl-ban (és feltehetően az összes alkáli halogenidben) az extra félsík kettős, a Burgers-vektor nagysága pedig $b = \sqrt{2} a_0$ (a_0 a kation–anion távolság). Ennek a kettős félsíknak a szegélyét mutatja az 1.1.b ábra, amelyen néhány lehetséges lépcső is látható. Az ábrán F -fel jelölt ún. teljes lépcső elektromosan semleges, a H_+ és H_- ún. fél lépcsők $+e/2$, illetve $-e/2$ töltést hordoznak (e az elemi töltés), végül a két azonos töltésű, szomszédos fél lépcsőből álló V_+ és V_- lépcsőpárok töltése $+e$, illetve $-e$. Utóbbiak tulajdonképpen a diszlokáción kötött anion-, illetve kation vakanciának felelnek meg. Mivel ezek a lépcsők képesek az éldiszlokációval együtt konzervatív módon mozogni, a töltéstranszport elvileg a töltött lépcsőket tartalmazó éldiszlokációk mozgásával magyarázható.

¹ Az irodalomjegyzékben Stepanow, mert az idézett cikk német nyelvű.

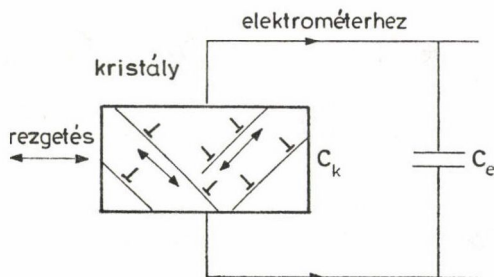


1.1. ábra. Eldiszlokáció környezetében kialakult ionelrendeződés a diszlokációra merőleges két szomszédos (001) síkban (a). Lépcsők a kettős extra félsíkon (b). Az üres körök az ábra síkjában, a satírozottak mögöttes $b/2$ távolságban elhelyezkedő ionokat jelölnek (Whitworth 1975 nyomán)

1.2. A diszlokációtöltés mérése és a mérésekből levonható következtetések

A Sztjepanov-effektus fenti értelmezése természetesen csak akkor fogadható el, ha segítségével a tapasztalt potenciálkülönbségek értelmezhetők. Ehhez — többek között — arra van szükség, hogy megmérjük a mozgó diszlokációk által szállított töltést. Erre a legkézenfekvőbb megoldás magának az effektusnak speciális körülmények között történő mérése. Mivel azonban a mérésnél az egyetlen információ a keletkezett potenciálkülönbség, amely még a legegyszerűbb deformációs elrendezés esetén is sok diszlokáció igen bonyolult elmozdulásainak eredménye, a diszlokációtöltés meghatározása komoly nehézségeket okoz. Ez az egyik oka annak, hogy az igen nagyszámú mérés ellenére hosszú ideig még a töltés előjelével kapcsolatban is viták voltak. Éppen ezekkel a nehézségekkel függ össze, hogy számos, az eredeti eljárástól lényegesen eltérő módszert is kidolgoztak. A mérési módszerek közül első sorban azokat választottam ki, amelyek a diszlokációtöltésre vonatkozó ismereteink, vagy saját munkám szempontjából fontosak.

Elsőként egy olyan módszert ismertetek, amely alapvetően különbözik az eredeti Sztjepanov-féle kísérlettől. Ennek lényege az, hogy a kristályba előzetesen bevitt, ismert mechanikai előjelű diszlokációkat periodikus külső mechanikai feszültséggel rezgőmozgásba hozzák, s mérik a kristály két szemben levő lapja között létrejövő periodikus elektromos feszültségváltozást (1.2. ábra). Az eredetileg Remaut és Vennik (1961) által kidolgozott módszert Whitworth (1967) fejlesztette tovább, és tette alkalmassá kvantitatív mérésekre. A mérésnél alkalmazott mintát egy nagyobb, előzetesen plasztikus hajlításnak alávetett kristályból vágják ki, s így a mintá-



1.2. ábra. A diszlokáció rezgésén alapuló módszer sémája (Whitworth 1967)

ban túlnyomórészt a hajlításnak megfelelő mechanikai előjelű éldiszlokációk vannak. Ezután a mintát periodikus terhelésnek vetik alá, ami a diszlokációk periodikus mozgását eredményezi. A diszlokációk elmozdulása miatt létrejött, időben változó ε_p plasztikus deformációt és a hozzátartozó U elektromos feszültséget mérve a diszlokációk hosszegységére jutó átlagos q töltés az

$$U(t) = \frac{A \sqrt{2} q}{\eta b (C_e + C_k)} \varepsilon_p(t) \quad (1.1)$$

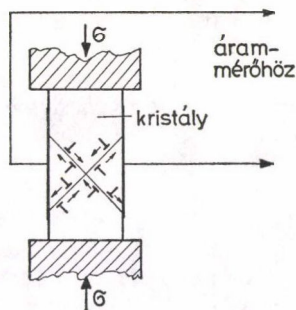
összefüggésből kapható meg. Itt A az elektródák felülete, b a Burgers-vektor nagysága, C_e az elektrométer-, C_k a kristály kapacitása, t az idő, η pedig az előzetes hajlításnak megfelelő és azzal ellentétes mechanikai előjelű diszlokációk q_+ és q_- sűrűségével kifejezett szám

$$\eta = \frac{q_+ + q_-}{q_+ - q_-}, \quad (1.2)$$

amelynek becsült értéke Whitworth kísérleteinél 1,0 és 1,5 között volt. Ezzel a módszerrel a diszlokációk által szállított töltés csak speciális körülmények között vizsgálható, amelyek erősen eltérnek a makroszkopikus plasztikus deformáció körülményeitől (pl. a diszlokáció ugyanazon a csúszási síkon sokszor ide-oda vándorol, maximális elmozdulása és sebessége kicsi).

A diszlokációtöltésnek a makroszkopikus plasztikus deformáció folyamatában történő mérésére a legkézenfekvőbb eljárás az eredeti Sztjepanov-féle kísérlet. Ennél a kristály egytengelyű összenyomása közben a kristályon elhelyezett két elektróda között keletkező elektromos feszültséget mérik, s a minta deformációjának ismeretében a diszlokációk mozgására vonatkozó feltevések alapján becslik a diszlokációk töltését. A módszert különféle elektróda elrendezésekkel (sokszor csupán kvalitatív vizsgálatra) sokan alkalmazták (Stepanow 1933, Caffyn és Goodfellow 1955, 1962, Whitworth és Glen 1963, Fröhlich és Suisky 1964, Martisev 1965, Grossetti és Brescia 1968). A deformációnál végbemenő bonyolult diszlokáció-mozgások miatt azonban a mért feszültség és a diszlokációk töltése között nehéz egyértelmű összefüggést találni, ezért ez a módszer nem elég megbízható.

Az egytengelyű nyomáson alapuló módszer precízebb kivitelezése Galusztasvili és Paperno (1974) nevéhez fűződik. Ők az 1.3. ábrán látható elrendezésben a külső



1.3. ábra. Egytengelyű nyomást (σ) alkalmazó módszer (Galusztasvili és Paperno 1974)

körben folyó áramot határozták meg, amelyet annak tulajdonítottak, hogy a két szemben levő, elektródával ellátott lapra nem azonos számú töltött éldiszlókáció fut ki. Az I áramon kívül ezért meghatározták a két elektródához kifutó éldiszlókációk sűrűségének Δq_e különbségét is. Ezekből az adatokból az egységnyi hosszúságú diszlókáció szakasz által átlagosan szállított q töltés a

$$q = \frac{I}{Av\Delta q_e} \quad (1.3)$$

összefüggésből számítható ki. Itt A az elektródák felülete, v pedig az éldiszlókációk átlagos sebessége, amelyet a

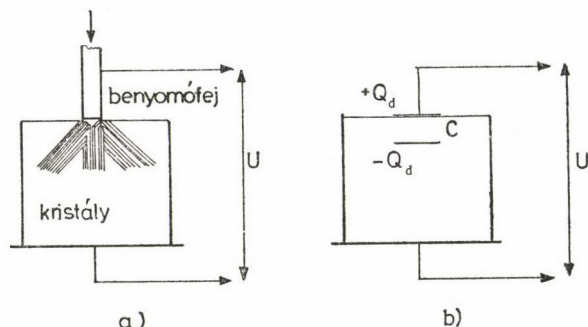
$$v = \frac{\dot{\epsilon}}{2bq_e} \quad (1.4)$$

összefüggésből kaptak meg ($\dot{\epsilon}$ a deformációsebesség, q_e a mozgásképes éldiszlókációk teljes sűrűsége, b a Burgers-vektor nagysága). A v sebesség meghatározásához újabb két paraméter ($\dot{\epsilon}$ és q_e) mérésére volt szükség. Mivel pedig I , Δq_e és q_e egyaránt erősen függ a teljes deformációtól, az összetartozó értékeket úgy határozták meg, hogy rögzített $\dot{\epsilon}$ mellett külön méréssorozatokkal felvették az $I-\epsilon$, $\Delta q_e-\epsilon$ és $q_e-\epsilon$ görbéket. A diszlókációsebesség változtatása érdekében azután a mérést különböző $\dot{\epsilon}$ értékek mellett megismételték. Új mérési hőmérsékleten az egész procedúrát újra végrehajtották. Mint az elmondottakból látható, a módszer nagyon bonyolult és munkaigényes, de sokkal megbízhatóbb eredményeket ad, mint az előbb tárgyalt deformációs módszerek.

Az utóbbi években több munka jelent meg, amelyben a diszlókációtöltést elektromos térnek a plasztikus deformációra gyakorolt hatása alapján határozták meg. A módszer azon a jelenségen alapul, hogy konstans sebességgel deformált kristályra erős (néhány MV/m) elektromos teret kapcsolva a deformációhoz szükséges feszültségben egy ugrásszerű csökkenés lép fel. A diszlókációtöltés mérése ezen a módon természetesen csak akkor lehetséges, ha a mechanikai feszültség csökkenése valóban a töltött diszlókációk jelenlétével függ össze. Ez a kérdés az irodalom tanúsága szerint egyelőre vitatott. A jelenséget először Kataoka és munkatársai (1975) figyelték meg, de nem a töltött diszlókációkkal, hanem Zuev és munkatársai (1974) nyomán

a tér által orientált szennyező—vakancia-párokkal (l. 2.1 pont) hozták kapcsolatba. Később *Whitworth* (1976a) majd *Brissenden* és *munkatársai* (1979) a kísérletet megismételve az effektust a diszlokációk töltésével magyarázták, s a diszlokációtöltés meghatározására használták. Ezzel szemben *Kulicsenko* és *Szmirnov* (1981) a hasonló módon végrehajtott mérései során kapott eredményeket egyik módon sem tudta kiértékelni. Ugyanerre a megállapításra jutott *Zuev* és *Szergejev* (1981) is.

A makroszkopikus deformáción alapuló módszerek másik típusa az ún. pontbenyomat-módszer, amellyel részletesebben foglalkozom, mert méréseim során ennek tökéletesített változatát használtam. Ezt a módszert először *Rueda* és *Dekeyser* (1961, 1963) alkalmazta kvalitatív vizsgálatokra. Lényege az, hogy a kristály egyik felületén gömbbel, gúlával vagy kúppal benyomatot hoznak létre, és mérik a benyomófej és a kristály ellenkező oldalán levő elektróda között létrejövő feszültséget (1.4a ábra). Mivel eléggé nagy benyomat esetén a diszlokációk túlnyomó többsége



1.4. ábra. A pontbenyomat-módszer vázlata (a) és elektromos helyettesítő képe *De Batist* és *munkatársai* (1967) szerint (b)

a benyomattól a kristály belseje felé mozog, a benyomófej a diszlokációk töltésével ellenkező előjelűre töltődik fel. Így a diszlokációk töltésének előjele meghatározható, a mért feszültség nagysága pedig durván tájékoztat a töltés nagyságáról. A módszernek számos változatát használták kvalitatív vizsgálatokra (*Fröhlich* és *Suisky* 1964, *Kiss* 1965, 1966, *Galusztasvili* 1970, *Politov* és *munkatársai* 1970, *Tóth* és *munkatársai* 1972). A diszlokációtöltés meghatározására szolgáló kvantitatív módszerként először *McGowan* (1965), majd — kiegészített formában — *De Batist* és *munkatársai* (1967) alkalmazták. Ebben a változatban a benyomat helyétől eltávozott diszlokációk töltését és a benyomófejnél maradt ellenkező előjelű töltést egy fiktív síkkondenzátor töltéseként fogták fel (1.4b ábra), és az összes elszállított töltést (Q_d) a

$$Q_d = CU \quad (1.5)$$

összefüggésből számolták ki (C a fiktív kondenzátor kapacitása, U az 1.4b ábra szerint mért feszültség). Az össztöltésnek az (1.5) összefüggésből történő számítása azonban elvileg hibás (*Tóth* és *Kiss* 1973), hiszen U nem a C kapacitáson mért feszültség. A módszer bizonyos részleteit mégis ismertetem, mert ezek a fenti elvi hiba ellenére használhatók. Ha feltesszük, hogy a Q_d össztöltést már ismerjük, akkor az egységnyi hosszúságú diszlokációs szakasz által szállított q töltés úgy kapható meg,

hogy az össztöltést elosztjuk az L összes éldiszlokációhosszal

$$q = \frac{Q_d}{L}. \quad (1.6)$$

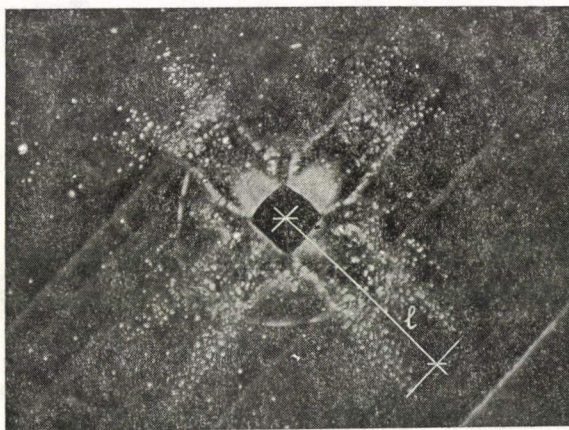
Az összes éldiszlokáció-hossz kifejezhető a benyomathatnál keletkező diszlokáció-hurkok N számával és azok élkomponensének átlagos l_E hosszával

$$L = N l_E. \quad (1.7)$$

A diszlokációhurkok számát a benyomat m mélységéből a McGowan (1965) által alkalmazott becsléssel

$$N = \frac{\sqrt{2} m}{b} \quad (1.8)$$

kaphatjuk meg (b a Burgers-vektor nagysága). A még ismeretlen l_E meghatározása érdekében De Batist és munkatársai részletesen tanulmányozták a benyomathatnál keletkező diszlokációs szerkezetet. A kristály felületét kémiai maratták, s így módon a felületre kibukkanó diszlokációknál keletkező maratási gödrök segítségével létrehozták a benyomat körül a jellegzetes diszlokációs rozettát (1.5. ábra). Ezután a



1.5. ábra. Pontbenyomat körül kialakult diszlokációs rozetta NaCl egykristály (100) felületén (l a rozettaág hossza). A rozetta előhívása kémiai maratással történt (Mendelson 1961), a nagyítás 200-szoros

kristály felületének sorozatos leoldásával és újramaratásával a rozettát létrehozó egyes diszlokációhurkok térbeli elhelyezkedését rekonstruálták. Megállapították, hogy a benyomófej által plasztikusan deformált tartomány M mélysége arányos az eredeti rozettaág l hosszával (1.5. ábra)

$$M = \alpha l, \quad (1.9)$$

ahol $\alpha \approx 0,7$, a hurkok élkomponenseinek átlagos hossza pedig közelítőleg

$$l_E = M, \quad (1.10)$$

így az (1.6)—(1.10) összefüggések alapján

$$q = \frac{Q_d b}{m \alpha l \sqrt{2}}. \quad (1.11)$$

Ha a Q_d számításánál elkövetett elvi hibát korrigáljuk, akkor a q és Q_d kapcsolatát megadó (1.11) összefüggés felhasználásával a pontbenyomat-módszer használhatóvá válik (3.11 pont).

Régi elgondolás, hogy a diszlokációk töltését azok elektromos tér hatására bekövetkező elmozdulásából határozzák meg. A módszerrel sokan próbálkoztak (*Svidkovszkij és munkatársai* 1962, *Zagorujko* 1966, *Blisztanov és munkatársai* 1966, *Caffyn és munkatársai* 1967a, *Zagorujko és munkatársai* 1971), de az alkalmazott elektromos tér kis értéke és a kiértékelést megnehezítő egyéb körülmények miatt az eredmények ellentmondóak voltak. Nemrégiben azonban *Colombo és munkatársai* (1982) ugyanezt a módszert használva rendkívül meggyőző és egyértelmű eredményeket kaptak. *Colombo és munkatársai* KCl kristály (100) felületén pontbenyomatot hoztak létre, majd a rövid ideig alkalmazott igen nagy elektromos tér hatására a diszlokációs rosettában bekövetkező változásokat figyelték meg. Egy bizonyos kritikus térerősség (kb. 10 MV/m) felett az éldiszlokációk egy része jelentősen (néhány mm-t) elmozdult. A kritikus tér megfelelő komponense (E_c) és az éldiszlokációk mozgatásához szükséges mechanikai feszültség (τ) között fennálló

$$qE_c = \tau b \quad (1.12)$$

összefüggésből az egységnyi diszlokációhosszon levő q töltés kiszámítható (b a Burgers-vektor hossza, τ -t a kritikus csúsztató feszültséggel azonosították). A módszer nagy hátránya, hogy extrém nagy elektromos tér alkalmazását kívánja.

A mérési módszerek áttekintése után röviden összefoglalom a diszlokációk által szállított töltéssel kapcsolatos legfontosabb kísérleti eredményeket és az azokból levonható következtetéseket. A legmegbízhatóbb ismereteink a *Whitworth* (1967)-féle „rezgetéses” módszerrel, *Galusztasvili és Paperno* (1974) „deformációs” módszerével, illetve *Colombo és munkatársai* (1982) „elektromos térrel mozgatott diszlokációkat” használó módszerével végzett mérésekből származnak. Emellett megemlítek néhány kevésbé meggyőző eredményt és következtetést is.

A rezgetetési módszerrel a legrészletesebb vizsgálatokat *Turner és Whitworth* (1970), illetve *Huddart és Whitworth* (1973) végezte kétvegyértékű kation szennyezőt (Mn) tartalmazó NaCl kristályokon. Megállapították, hogy a diszlokációk a töltést mozgásuk során fokozatosan gyűjtik össze, és a megállás után lassan elveszítik azt. A töltés előjele negatív volt, tehát — a korábbi irodalmi tapasztalatok többségével összhangban — megegyezett a kristályban túlsúlyban levő kation vakanciák töltésének előjelével (a kétvegyértékű kation szennyezők többlet kation vakanciákat keltenek). Az egységnyi hosszúságú diszlokációs szakasz által összegyűjtött maximális töltés a diszlokáción lehetséges összes kation vakancia töltésének közelítőleg a fele ($-1,4 \cdot 10^{-10}$ C/m) volt.

Ezek az eredmények megerősítették *Pratt* (1961) feltevését, hogy a diszlokációk a többségben levő kation vakanciák felszedésével töltődnek fel. A felszedett vakan-

ciák a korábban tárgyalt módon lépcsőpárok formájában kötődhetnek a diszlokációhoz, s egy kation felvételével el is hagyhatják azt. A diszlokációk megállása után bekövetkező töltéscsökkenés arra utal, hogy a mozgás közben felszedett töltés nem egyensúlyi jellegű, így leírására az egyensúlyi diszlokációtöltésre vonatkozó elméletek (1.3 pont) nem alkalmazhatók. Azt a tapasztalatot, hogy a vakanciahelyeknek kb. a fele töltődik be, csak kvalitatív energetikai megfontolásokkal sikerült többé-kevésbé plauzibilissá tenni.

A deformációs módszert használva *Alsic és munkatársai* (1975) Mg szennyezést tartalmazó LiF kristályban három különböző hőmérsékleten meghatározták a diszlokációtöltésnek a diszlokációk átlagos sebességétől való függését. Kis sebességeknél a töltés mindhárom hőmérsékleten a *Huddart és Whitworth* (1973) által is tapasztalt maximális értéket veszi fel, majd egy — a hőmérséklettel exponenciálisan növekvő — kritikus sebességnél esni kezd. Nagy sebességeknél a töltés a maximális értéknél több nagyságrenddel kisebb értéken ismét állandósulni látszik (a vizsgált nagysebességű szakasz elég rövid). Ezeknek a méréseknek alapvető újdonsága az, hogy a töltés a diszlokációk sebességétől is függ, s a sebességfüggés jellege a töltésszállítás termikusan aktivált mechanizmusára utal. A töltés előjele ebben az esetben is negatív volt.

Igen fontos a *Colombo és munkatársai* (1982) által kapott eredmény, amely szerint elektromos térben csak az éldiszlokációk mozdultak el. Ez ugyanis az egyedüli közvetlen tapasztalat, amely alátámasztja az 1.1 pontban említett elméleti következtetést, hogy töltést csak éldiszlokációk szállítanak. Kétvegyértékű kation szennyezőt tartalmazó kristályaikban ők is negatív diszlokációtöltést tapasztaltak, a töltés nagysága ($q = -7 \cdot 10^{-11}$ C/m) pedig megközelítette a *Huddart és Whitworth* (1973) által feltételezett maximális értéket (ez KCl-ben $-1,2 \cdot 10^{-10}$ C/m).

Kevésbé meggyőzőnek tűnik az a következtetés (*Huddart és Whitworth* 1973, *Whitworth* 1975, 1976b, 1978), hogy a diszlokációk által felszedett töltés zömmel a szennyező ion—kation vakancia-párok szétszakításából származik. A következtetés alapja az, hogy a tapasztalt nagy diszlokációtöltés felszedéséhez nincs elég szabad kation vakancia, ha a diszlokációk csak a velük közvetlenül ütköző vakanciákat szedhetik fel. Ez utóbbi feltételezésnek azonban ellentmondanak *Alsic és munkatársai* (1975) eredményei, amelyek diffúziós mechanizmust sugallnak. *Whitworth* elképzelését támasztotta alá az a tapasztalat, hogy a plasztikus deformációt követően kétvegyértékű kation szennyezőt tartalmazó NaCl kristályban a dielektromos veszteség kicsi, majd fokozatosan nőni kezd (*Shine és McCrone* 1968). A szerzők ezt úgy értelmezték, hogy a veszteséget adó szennyező—vakancia-párok a deformáció során szétszakadnak, majd fokozatosan újra egyesülnek. Nemrégiben azonban *Bielig és Lilley* (1980) kimutatta, hogy a dielektromos veszteség növekedése nem a szennyező—vakancia-párok számának növekedésével, hanem a töltött diszlokációk mozgásával függ össze. Ugyancsak a szennyező—vakancia-párok szétszedését próbálta igazolni *Andronikasvili és Galusztasvili* (1983) is, akik a pontbenyomat-módszert használva a diszlokációtöltésnek a szennyező—vakancia-párok orientációjától való függését vizsgálták. Megállapították, hogy a felszedett töltés nagyobb, ha a szennyező—vakancia-párok a diszlokációk csúszási síkjára merőlegesen állnak, mint párhuzamos állás esetén. Eltekintve attól, hogy ez még önmagában nem bizonyítja a szétszedést, a kísérlet körülményei kétséggé teszik, hogy a szennyező—vakancia-párok valóban orientáltak voltak. Az orientálás ugyanis úgy történt, hogy a 400 °C-on elektromos térben hőkezelt kristályokat szobahőmérsékletre hűtötték, majd kivették a térből.

Ezután — ugyancsak elektromos tér nélkül — több benyomatnál megmérték a keletkező feszültséget. ITC (ionic thermoconductivity) mérések alapján viszont megállapítható (pl. *Bucci és munkatársai* 1966), hogy szobahőmérsékleten elektromos tér nélkül az orientált állapot igen gyorsan (másodpercnél rövidebb idő alatt) eltűnik. Az elmondottak azt mutatják, hogy a szennyező—vakancia-párok szétszedése elképzelhető, de diffúziós töltésszállítást is megengedve, nem szükségszerűen megvalósuló folyamat (vö. 3.2 pont).

Vitatott kérdés a diszlokációk által szállított töltés hőmérsékletfüggése is. A kísérleti eredmények többségéből a hőmérsékletfüggésre semmiféle szabályszerűséget nem lehet megállapítani, ami *Whitworth* (1975) szerint a mérésekkel kapcsolatos két fő problémára vezethető vissza. Az egyik az, hogy a legtöbb eljárás a kristály különböző pontjai között létrejövő potenciálkülönbség mérésén alapul. A hőmérséklet emelésével azonban a kristály vezetőképessége rohamosan nő, és a potenciálkülönbségek igen gyorsan kiegyenlítődnek. Emiatt a mérésből a valóságosnál kisebb (esetleg nulla) töltés adódik. A másik probléma az, hogy magasabb hőmérsékleten a szállított töltés valóságos csökkenése is lehetséges a kétvegyértékű kation szennyezők mozgékonyságának megnövekedése miatt. Ezek a diszlokációval együtt mozogva kompenzálhatják a szállított vakanciák töltését. A hőmérséklettel egyértelműen növekvő töltést talált *Tóth* (1976), de a hőmérsékletfüggés igen gyenge volt, ami valószínűleg a fenti első problémával függ össze. A hőmérséklettel igen gyorsan növekvő diszlokáció töltést tapasztalt *Kolomijcev* (1971) és *Alsic és munkatársai* (1975). *Kolomijcev* méréseinek helyességét azonban *Whitworth* (1975) megkérdőjelezi, mert a mérésnél alkalmazott két különböző elektróda miatt a rendszer a hőmérséklet növekedésével csökkenő belső ellenállású galvánelemként működhet. A legmegbízhatóbbak *Alsic és munkatársai* eredményei, akik megállapították, hogy a hőmérsékletfüggés jellege függ a diszlokációsebességtől is és, erős hőmérsékletfüggés csak közepes sebességek mellett várható.

A diszlokációtöltés előjele és a többségben levő vakanciák közötti összefüggés bizonyítása érdekében számos vizsgálatot végeztek anionnal szándékosan szennyezett alkáli halogenid kristályokban (*Rueda és Dekeyser* 1961, 1963, *Caffyn és munkatársai* 1967b, *Tyapunyina és Kolomijcev* 1973). A feltevés az volt, hogy az anion szennyezők által létrehozott többlet anion vakanciák miatt a diszlokációk töltése pozitív lesz. A töltés valóban pozitívnak adódott, de mivel az anion szennyezőknek a kristályba történő beépülése meglehetősen problematikus kérdés, a pozitív töltés létrejöttének oka nem teljesen világos (*Whitworth* 1975). Hasonlóan problematikusak a kevés ($< 10^{-4}$ mol/mol) kétvegyértékű kation szennyezőt tartalmazó, levegőn növesztett kristályokon végzett mérések is. Ezek a kristályok gyakran úgy viselkednek, mintha anion szennyezést tartalmaznának. Ennek oka az, hogy a növesztés során a levegőből OH^- (esetleg O^{2-}) ionok jutnak be a kristályba, és a kétvegyértékű kation szennyezőkkel kémiai reakcióba lépve (*Fritz és munkatársai* 1963, *Fröhlich és Adametz* 1967, *Andrejev* 1965) azok hatását részben vagy egészen kompenzálják. Ilyen kompenzáló hatás természetesen nagyobb kation szennyezés esetén is fellép, de a diszlokációtöltés előjelét nem változtatja meg, legfeljebb a nagyságát módosítja. Az anion szennyezők tehát (bárhogyan jutottak a kristályba) a mérési eredmények kiértékelését megnehezítik, vagy egyenesen lehetetlenné teszik. A diszlokációtöltéssel kapcsolatos ellentmondó eredményeknek — a mérési módszerek említett tökéletlenségei mellett — éppen a kontrollálatlan körülmények között előállított, OH^- szennyezést tartalmazó kristályok használata az oka.

1.3. A diszlokációtöltés elméleti leírása

Annak ellenére, hogy a töltött diszlokációkkal kapcsolatos kísérletek többségében mozgó diszlokációk játsszák a főszerepet, a diszlokációtöltést elméletileg szinte kizárólag álló, termikus egyensúlyban levő diszlokációra tárgyalták. Mozgó diszlokációkra vonatkozóan mindössze két rendkívül leegyszerűsített — konkrét számolásra alkalmatlan — modell ismeretes.

A diszlokációtöltés első elméletei *Frenkel* (1946) és *Lehovec* (1953) munkáin alapulnak, akik kimutatták, hogy szennyezetlen alkáli halogenid kristályokban a kristály felületein elektromos kettősréteg jelenhet meg. Ennek oka az, hogy az egyébként azonos számú kation- és anionvakancia képződési energiája a felületen eltérő. Ezt az elméletet *Eshelby és munkatársai* (1958) kiterjesztették kétvegyértékű kation szennyezőt tartalmazó kristályra, s a diszlokációt belső felületnek tekintve, a diszlokációtöltés számítására is alkalmazták. Egyik eredményük az volt, hogy a diszlokáció és a kristály között létrejövő potenciálkülönbség függ a hőmérséklettől, s bizonyos hőmérsékleteken eltűnik. Ezeket az ún. izoelektromos pontokat sokan keresték, meglehetősen ellentmondó és nehezen értelmezhető eredményekkel (*Davidge* 1963, *Strumane és De Batist* 1964, *Kliwer és Kohler* 1967, *Spencer és Plint* 1969, *Whitworth* 1973). Kiszámították a diszlokációnak a körülötte kialakult töltésfelhőből való kihúzásához szükséges erőt is. Eredményeik alapján feltételezték, hogy a szennyezett NaCl kristályok folyáshatárának jelentős részét ez az effektus adja.

A fenti elmélet alapvető hibája, hogy a felületet, illetve a diszlokációt végtelen befogadóképességű vakancia-forrásnak vagy nyelőnek tekinti. Meghatározott számú vakanciahely feltételezésével a problémát *Lifsic és Geguzin* (1965), majd *Lifsic és munkatársai* (1967) tárgyalták. Az elmélet legfejlettebb változatát *Whitworth* (1968, 1972) dolgozta ki, de a használt paraméterek (a vakancia képződési energiája a diszlokáció közelében, a diszlokáció—vakancia-kötési energia) értékének bizonytalansága miatt a diszlokációtöltés nagyságára nem sikerült megbízható eredményeket kapnia. A diszlokáció kimozdításához szükséges erő becslése azonban azt mutatta, hogy szemben *Eshelby és munkatársai* (1958) feltételezésével, ez az erő csak elhanyagolhatóan kis járulékot adhat a folyáshatárhoz.

A mozgó diszlokációk által szállított töltés magyarázatára *Whitworth* (1967) dolgozott ki egy rendkívül leegyszerűsített elvi modellt. Ennek lényege az, hogy a diszlokáció a mozgása során vele ütköző kationvakanciákat bizonyos w_f valószínűséggel felveszi, s a szállított vakanciákat bizonyos leszedő centrumokkal (pl. szennyező ionok, szennyező—vakancia-párok) való ütközéskor w_l valószínűséggel elveszítheti. Ha a felszedhető vakanciák atomi koncentrációja c_v , a leszedő centrumoké c_l , akkor a diszlokáción a vakanciák c koncentrációját stacionárius állapotban az

$$(1 - c)w_f c_v - w_l c_l c = 0 \quad (1.13)$$

egyenletet adja meg. A w_f és w_l valószínűségeket azonban nem ismerjük, így az egyenlet konkrét számításokra nem alkalmazható.

Lényegében ugyanilyen elvi mérlegegyenletet használnak *Alsic és munkatársai* (1975) is, csak mind a vakanciafelvételt, mind pedig a vakancialeadást kibővítik egy-egy diffúziós jellegű folyamattal. Ha n_i az időegység alatt diffúzióval a diszlokációra jutó, n_f pedig a diszlokáció által közvetlen találkozás útján időegység alatt felszedett vakanciák száma, w_i a termikus aktiváció útján bekövetkező, w_l pedig a leszedő

centrumok által okozott vakancia elvesztés időegységre vonatkozó valószínűsége, akkor a diszlokáción levő vakanciák n számára az

$$n_t + n_f - (w_t + w_l) n = 0 \quad (1.14)$$

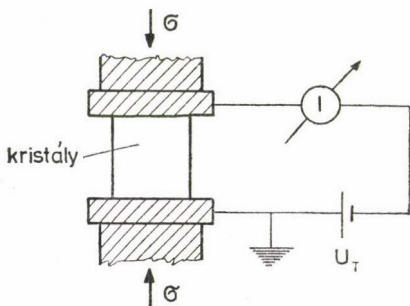
egyenlet írható fel. Itt természetesen n_t , n_f , w_t és w_l ismeretlen, vagyis most nem két, hanem négy olyan mennyiség lép fel, amelyeknek az értékéről gyakorlatilag semmit sem tudunk. Számszerű eredmények ezzel a modellel sem kaphatók, de a vakanciaszállítás diffúziós mechanizmusának felvetése értékes többletnek tekinthető.

1.4. A Gyulai—Hartly-effektus mérése és értelmezései

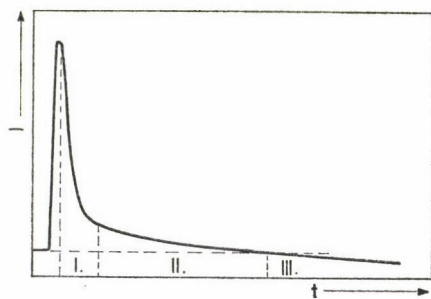
Ez a jelenség, amely nevét első megfigyelőiről (*Gyulai és Hartly* 1928) kapta, abban áll, hogy egy áramkörbe kapcsolt (1.6. ábra) alkáli halogenid kristályt plasztikusan deformálva a körben folyó áram drasztikus módon (1-2 nagyságrenddel) megnő, majd a deformáció megszűnése után fokozatosan lecsökken. Az áram növekedését *Gyulai és Hartly* a kristály vezetőképességének megnövekedésével magyarázta. Mint később kiderült (*Stepanov* 1933), a külső körben létrejött áramot a Sztjepanov-effektus is okozhatja, ezért hosszú ideig kérdéses volt, hogy egyáltalán külön jelenségről van-e szó (pl. *Rueda* 1963). Bebizonyosodott azonban (*Jeszenszky és Kiss* 1962), hogy természetes kőso kristályok szimmetrikus terhelése esetén nem lép fel a Sztjepanov-effektus, míg a vezetőképesség-változás megfigyelhető.

A deformáció közben létrejövő vezetőképesség-változás közvetlen meghatározására két mérési módszer használatos.

Az egyik a *Gyulai és Hartly* által is használt eljárás, amelynél az 1.6. ábrán látható elrendezésben a terhelést súlyok felrakásával ugrásszerűen növelik. Ilyenkor az áram (és a feltevés szerint a vezetőképesség is) az 1.7. ábrán sematikusabban ábrázolt



1.6. ábra. A Gyulai—Hartly-effektus mérésének vázlata

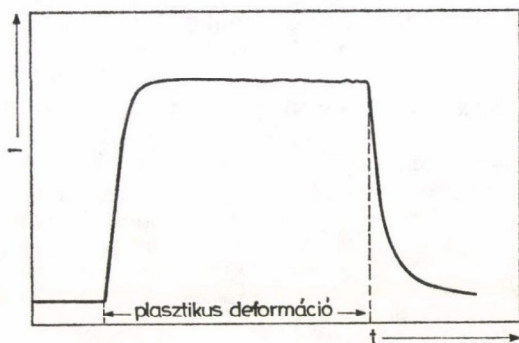


1.7. ábra. Hirtelen alkalmazott terhelésnél kapott jellegzetes áramváltozás Gyulai—Hartly-effektusnál

jellegzetes időbeli változást mutatja. A Sztjepanov-effektus kiküszöbölése különböző tapasztalati eljárásokkal (*Taylor és Pratt* 1958, *Kiss* 1966, 1968, *Whitworth* 1975) érhető el. Ezek közé tartozik a lapos minták alkalmazása, a minták előzetes deformálása, a homogén deformáció biztosítása. Ugyancsak tapasztalati tény, hogy a

levegőn növesztett, OH^- -tartalmú kristályokban a Sztjepanov-effektus többnyire elfedi a Gyulai—Hartly-effektust. Ha a Sztjepanov-effektus nem lép fel, akkor külső elektromos feszültség nélkül a körben nincs áram, külső feszültségforrás esetén pedig az áram követi a feszültség előjelének és nagyságának változását. Ilyenkor az egymást követő azonos terheléseknél kapott áramgörbék (1.7. ábra) közel azonos magasságúak és lefutásuk is hasonló.

A másik mérési módszernél (Camagni és Manara 1965) szintén az 1.6. ábra szerinti elrendezést használják, de a hirtelen alkalmazott terhelés helyett a mintát állandó deformációsebességgel deformálják. Ekkor rövid idő alatt egy állandósult többletáram alakul ki, amely a deformáció leállításakor eltűnik (1.8. ábra). A mérések során előzetes deformációval és a homogén deformáció biztosításával a Sztjepanov-effektust sikerült kiküszöbölni.



1.8. ábra. Állandó sebességű deformáció közben kialakuló állandósult áram Gyulai—Hartly-effektusnál

Az effektus lecsengésének vizsgálata azt mutatja, hogy ennek első — a deformáció megszűnését közvetlenül követő — szakaszában az áram igen gyorsan (5—10 s időállandóval) csökken (Jeszenszky és Kiss 1962, Camagni és munkatársai 1960, Camagni és Manara 1965). Ezután egy lassúbb csökkenés következik (Fischbach és Nowick 1958, Kiss 1966, 1968), amelynek során kb. 10 perc alatt az áramnövekmény teljesen eltűnik. A legtöbb esetben ezután az áram tovább csökken, vagyis kisebb lesz, mint a deformálatlan kristályban volt (Fischbach és Nowick 1957, Royce és Smoluchowski 1961, Sutter és Nowick 1963, Kiss 1966, 1968, Fröhlich és munkatársai 1971, Hooper 1971, Fröhlich és Hensel 1973). Az előbb ismertetett három szakasz az 1.7. ábrán látható, s a továbbiakban a szakaszok megjelölésére az ábra római számait használom. Több szerző (pl. Camagni és Manara 1965, Kiss 1966) által ellenőrzött tapasztalat, hogy az áramnövekmény mindhárom szakaszban követi a

$$\vec{j} = \gamma \vec{E} \quad (1.15)$$

Ohm-törvényt, vagyis valódi vezetőképesség-változásról van szó (\vec{j} az áramsűrűség, \vec{E} az elektromos térerősség, γ a vezetőképesség).

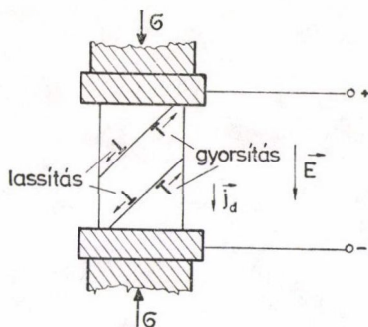
Ami a deformáció során létrejövő vezetőképesség-növekedés magyarázatát illeti, itt a kép meglehetősen változatos. Seitz (1950, 1952) a növekedést többlet-kation-vakanciák megjelenésével magyarázta. A vakanciák Seitz szerint a diszlokációk

mozgása során keletkeznek, vagy a fél lépcsőkről történő leválással, vagy a csavar-diszlokációkon létrejött lépcsők nemkonzervatív mozgása révén. Lényegében hasonló álláspontra helyezkedik *Taylor és Pratt* (1958) is. Ezzel szemben *Tyler* (1952) arra a tapasztalatra hivatkozva, hogy színezett kristályokban az effektus nagyobb (*Gyulai és Boros* 1940), a diszlokációk által keltett szabad elektronoknak tulajdonította a jelenséget. *Fischbach és Nowick* (1958) szerint viszont a vezetőképesség növekedését az okozza, hogy a diszlokációk kétvegyértékű kation szennyezőből és kationvakanciából álló párokat szakítanak szét, növelve ezzel a vezetésben résztvevő szabad kationvakanciák számát. *Kiss* (1966, 1968) az effektust ellenkező mechanikai előjelű diszlokációk annihilációval járó találkozása során felszabaduló vakanciák megjelenésével magyarázta. Az elképzelést arra alapozta, hogy az effektus függ a minta és a deformáció geometriájától. *Camagni és munkatársai* (1960), illetve *Camagni és Manara* (1965) az effektus hőmérsékletfüggését vizsgálva megállapította, hogy a vakanciamechanizmussal csak a tapasztaltnál sokkal erősebb hőmérsékletfüggés volna összeegyeztethető. A gyenge hőmérsékletfüggés a Tyler-féle elektronkeltés mellett szól, de ez túlságosan megalapozatlan lévén, *Camagni és Manara* inkább a feltehetőleg (*Thermalizingam* 1964) nagyon gyorsan mozgó rácsközi ionok keletkezését tartja valószínűnek.

A vezetőképesség-csökkenés említett három szakaszának (1.7. ábra) értelmezése ugyancsak problematikus. A II. és III. szakaszra vonatkozóan eléggé általánosan elfogadott az a magyarázat, hogy itt a deformáció során keletkezett többlet-kationvakanciák eltűnéséről van szó (*Whitworth* 1975, 1976b). Nem tisztázott azonban, hogy a vakanciák hogyan tűnnek el. *Shine és McCrone* (1968) II. szakaszban végrehajtott dielektromos veszteség mérései igazolni látszottak azt a feltevést, hogy a *Gyulai—Hartly*-effektust a szennyező—vakancia-párok szétszedése okozza, a vezetőképesség csökkenése pedig ezen párok újraképződésével (a veszteség nő), illetve aggregációs folyamatokkal függ össze. *Bielig és Lilley* (1980) azonban kimutatták, hogy a dielektromos veszteség változása nem eredhet a szennyező—vakancia-párok számának változásából, hanem a töltött diszlokációk mozgásával magyarázható. A vakanciák számának az eredeti érték alá csökkenését (III. szakasz) a deformáció közben létrejött vakancianyelők (pl. diszlokáció-dipólok, hurkok) működésének tulajdonítják (*Whitworth* 1975, 1976b).

Míg a II. és III. szakaszban a sok probléma ellenére legalább a többlet-vezetőképességet okozó töltéshordozók mibenléte nem vitatott, addig az effektus legjelentősebb összetevője és annak lecsengése (I. szakasz) megfelelő töltéshordozó híján sok megalapozatlan feltevéshez vezetett (elektronok, rácsközi ionok). Ennek fő oka az, hogy az effektus hőmérsékletfüggése mellett a lecsengés nagy sebessége (*Camagni és Manara* 1965) szintén arra utal, hogy a töltéshordozók nem lehetnek vakanciák, ugyanakkor az Ohm-törvény teljesülése valódi vezetőképesség változást sugall. Végül *Whitworth* (1975, 1976b) javasolt egy modellt, amellyel egyidejűleg értelmezni lehet az áramnövekmény kétségtelenül legnagyobb járulékát és a lecsengés I. szakaszát.

A modell lényege az, hogy a többletáramot nem szokásos értelemben vett töltéshordozók okozzák, hanem a deformáció során elmozduló töltött diszlokációk. Természetesen itt nem a Sztjepanov-effektusról van szó, amelynek alapvető feltétele a deformáció aszimmetrikus volta. A modellben az eredetileg szimmetrikus deformáció során az azonos számú, ellentétes irányban haladó, ellentétes mechanikai előjelű, de azonos elektromos töltésű diszlokációk mozgása a külső elektromos tér hatására



1.9. ábra. Az elektromos tér hatása negatív töltésű éldiszlókációk mozgására

válík aszimmetrikussá. Az elektromos tér ugyanis az egyik irányban mozgó töltött diszlókációkat gyorsítja, az ellenkező irányban mozgókat pedig lassítja (1.9. ábra). A sebességkülönbség miatt a kristályban létrejövő j_d áramsűrűsége *Whitworth* a

$$j_d = \frac{q^2 m^* \dot{\epsilon}}{b^2 \tau^*} \vec{E} \quad (1.16)$$

összefüggést kapta (q a diszlókációk hosszegységre jutó átlagos töltése, $\dot{\epsilon}$ a deformációsebesség, b a Burgers-vektor nagysága, τ^* a diszlókációk mozgatásához szükséges mechanikai feszültség egyik összetevője, az ún. effektív feszültség, m^* pedig a diszlókációsebességnek a τ^* effektív feszültségtől való függésére jellemző állandó; részletesebben 1. 2.1 és 2.2 pont). Figyelemre méltó, hogy az áram követi az (1.15) Ohm-törvényt, és a vezetőképességnek a diszlókációktól származó γ_d összetevője

$$\gamma_d = \frac{q^2 m^* \dot{\epsilon}}{b^2 \tau^*}. \quad (1.17)$$

A modell ezenkívül értelmezni tudja a gyors lecsengést is, hiszen az a diszlókációk megállásával függ össze. *Whitworth* becslései azt mutatják, hogy az (1.16) összefüggés az áramnövekmény nagyságrendjére is kielégítő eredményt ad.

1.5. A diszlókáció—vakancia-kölcsönhatás számítása alkáli halogenidekben

Az eddig tárgyalt jelenségekben alapvető szerepet játszik az éldiszlókációk és kationvakanciák kölcsönhatása. A jelenségek pontosabb megértéséhez tehát szükség van a kölcsönhatás kvantitatív jellemzésére.

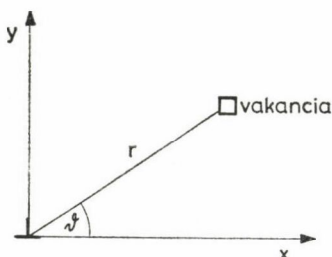
A kölcsönhatási energia számítására az egyik lehetőség az, hogy a kristályhibák kontinuum elméletében levezetett összefüggéseket (*Kovács* 1970) használjuk. Egyenes éldiszlókáció és vakancia kölcsönhatási energiájának a mérethatásból származó része (U_s) az

$$U_s = \frac{\mu b(1+\nu)}{3\pi(1-\nu)} \Delta V \frac{\sin \vartheta}{r} \quad (1.18)$$

összefüggésből számítható (μ a nyírási modulusz, ν a Poisson-szám, ΔV a vakancia által okozott térfogatváltozás, r és ϑ az 1.10. ábrán látható). A moduluszhatásból származó rész pedig

$$U_M = \frac{15\mu b^2 V_H}{8\pi(1-\nu)(7-5\nu)} \left[1 - \frac{1+6\nu-5\nu^2}{5} \sin^2 \vartheta \right] \frac{1}{r^2}, \quad (1.19)$$

ahol V_H a vakancia térfogata. Ezek az összefüggések azonban a diszlokáció közelében nem adnak helyes eredményt.



1.10. ábra. A diszlokáció—vakancia-kölcsönhatást megadó összefüggésekhez

A diszlokáció közvetlen közelében uralkodó viszonyokról az ionelmozdulások atomisztikus számítása adhat tájékoztatást. Az ionkristályok rácshibáinak atomisztikus számítása terén az utóbbi időben igen komoly fejlődés indult meg (*Faux és Lidiard* 1971, *Lidiard és Norgett* 1972, *Catlow és munkatársai* 1976, *Puls és munkatársai* 1977, *Catlow* 1980), de kevés olyan munka ismeretes, amelyben a diszlokáció—vakancia-kölcsönhatást számolják.

NaCl kristályban *Bassani és Thomson* (1956) számította ki a kationvakancia és éldiszlokáció közötti kötési energiát a vakancia két helyzetében. A számításokat a mindmáig használatos Born—Mayer-moddal (*Born és Mayer* 1932) végezték a „két tartomány”-stratégiával (a hiba közelében atomisztikus számítás, távolabb az ionelmozdulások közelítő számítása kontinuum modellel). A diszlokációhoz legközelebb eső rácspontban a diszlokáció komprimált zónájában a kötési energiára 0,4 eV, a dilatált zónában pedig 0,2 eV értéket kaptak. A számítás hibáját 0,2 eV-ra becsülték.

Nagyteljesítményű számítógéppel és a Born—Mayer-modell tökéletesített változatával *Puls és munkatársai* (1977), illetve *Puls* (1980a) a kation- és anionvakancia éldiszlokációval való kölcsönhatásának energiáját a vakancia sok helyzetében kiszámították az NaCl rács típusba tartozó MgO kristályban. Kiderült, hogy a kölcsönhatási energia nem mutat olyan szabályszerűségeket, mint ami az (1.18)—(1.19) összefüggések alapján várható, s kb. 5 rácscellányi távolságon belül elég nehéz valamilyen analitikus távolságfüggést megadni. A kation vakanciára kapott legnagyobb kötési energia 1 eV. A számszerű eredmények nyilván nem vihetők át alkáliföldfémekre, de a távolságfüggés jellege feltehetőleg ott is hasonlóan bonyolult.

Mivel atomisztikus számításokból származó eredmények a legtöbb esetben nem állnak rendelkezésre, a kölcsönhatási energia számítására rendszerint a kontinuum elmélet összefüggéseit használják. A diszlokáció magja közelében a kölcsönhatási energia lényegében illesztési paraméter szerepét játssza, amelynek értékei valamilyen kísérleti eredményekkel történő összehasonlításból határozhatók meg.

2. KÉTVEGYÉRTÉKŰ KATION SZENNYEZŐK FOLYÁSHATÁR-JÁRULÉKA ALKÁLI HALOGENIDEKBEN

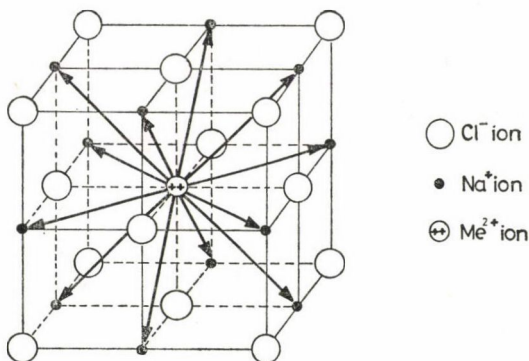
A szennyezések folyáshatár-növelő hatása eléggé általános, az anyagok többségénél megfigyelt jelenség (*Seeger* 1958, *Kovács* 1981b). Az alkáli halogenidekben különösen jelentős folyáshatár-növekedést okoznak a kétvegyértékű kation szennyezők. Az irodalom áttekintését e szennyező típus kitüntetett szerepének kvalitatív vizsgálatával és a folyáshatár-járulék mérésével kapcsolatos problémák ismertetésével kezdem. Ezután tárgyalom a jelenség magyarázatára kidolgozott legfontosabb elméleti módszereket és összefüggéseket. Végül ismertetem a kísérleti eredményeket, és egyúttal az elméletnek a kísérletekkel történő összevetését is elvégzem.

2.1. A folyáshatár-járulék eredete és meghatározása

Régóta tudjuk (*Edner* 1932, *Metag* 1932, *Schönfeld* 1932), hogy alkáli halogenidekben a kétvegyértékű kation szennyezők által okozott folyáshatár-növekmény 1–2 nagyságrenddel felülmúlja az egyvegyértékű kation szennyezők hatását. Mivel ez az eltérés nem magyarázható egyszerű mérethatással, kézenfekvő, hogy okát az alaprácsba történő beépülés körülményeinek különbözőségében keressük. Eléggé kis koncentráció esetén mindkét szennyező típus helyettesítéssel épül be. Az alapvető különbség az, hogy míg a kétvegyértékű kation szennyező kationvakanciát hoz létre, és ezzel ún. szennyező–vakanciapárt (a továbbiakban SzV-pár) alkothat (*Lidiard* 1957, *Barr* és *Lidiard* 1970), addig egyvegyértékű kation szennyező esetén ilyen párok nem jönnek létre. Az irodalomban általánosan elfogadott, hogy a folyáshatár-járulékban megfigyelt fenti különbség és a kétvegyértékű kation szennyezők kiugróan nagy folyáshatár-járuléka a SzV-párok jelenlétével függ össze (*Mitchell* és *Heuer* 1977). A SzV-pár lehetséges orientációit alkáli halogenid rácsban a 2.1. ábrán mutatom be. Itt és a továbbiakban csak olyan SzV-párokkal foglalkozom, ahol a szennyező és vakancia a lehető legközelebb ($\sqrt{2} a_0$ távolságban) van egymáshoz. Az ilyen elrendezést az irodalomban a SzV-pár alapállapotának nevezik.

A szennyezők folyáshatár növelő hatásának mechanizmusa elvben egyszerű: a szennyezők rácsstorzulást hoznak létre a rácsban, és a diszlokációkkal kölcsönhatásba lépve, azok mozgását akadályozzák. A SzV-párok a rácsban anizotróp deformációt okoznak, és a feltevések szerint (*Fleischer* 1962a) ezzel magyarázható, hogy a diszlokációkat akadályozó hatásuk jóval nagyobb, mint az egyedül álló (gömbszimmetrikus) szennyező ionoké. A SzV-párok feltételezett szerepének vizsgálatához mindenképp a szennyezők folyáshatár-járulékának mérése szükséges.

A szennyezők hatásának kísérleti vizsgálata két ok miatt nehéz. Az egyik, hogy a diszlokációk mozgását nemcsak a szennyezők befolyásolják, így a teljes folyás-



2.1. ábra. Alapállapotban levő szennyező—vakancia-pár lehetséges orientációi NaCl rácsban

határból le kell választani a megfelelő járulékot. A másik, hogy a kristályban a szennyező különböző állapotaiban más és más folyáshatár-járulékot ad, így a szennyezőtől származó különféle járulékokat egymástól is szét kell választani.

A folyáshatár, illetve a vele arányos τ kritikus csúsztatófeszültség (KCsF)² két részből tevődik össze (Seeger 1958)

$$\tau = \tau_i + \tau^* \quad (2.1)$$

Az egyik rész (τ_i) a diszlokációkra ható hosszú távú kölcsönhatásokból; a másik (τ^*) pedig a diszlokációknak lokális akadályokkal történő rövid távú kölcsönhatásából származik. A τ_i összetevő a hőmérséklettől alig függ, és gyakran belső feszültségnek nevezik. Ezzel szemben τ^* a diszlokáció termikusan aktivált mozgásával függ össze, és erősen hőmérsékletfüggő; szokásos elnevezése effektív feszültség.

A szennyezések KCsF-járuléka legtöbbször az effektív feszültséggel azonosítható. Sajnos annak ellenére, hogy a két feszültségkomponens szétválasztására számos kísérleti módszer ismeretes (pl. Conrad 1970), a kísérleti munkák legnagyobb részében csak a teljes folyáshatárt mérik meg, és a szennyezők járuléka így csak nagyon pontatlanul vagy egyáltalán nem választható le. A teljes folyáshatárt rendszerint egytengelyű nyomással (Sprackling 1976), az effektív feszültséget legtöbbször feszültségrelaxációs kísérletből (pl. Gupta és Li 1970) határozzák meg.

A kétvegyértékű kation szennyezők az alkáli halogenid rácsban különböző állapotban lehetnek (Hartmanová 1971). Magas hőmérsékleten, ahol a SzV-párok szétesnek, a szennyezők egyedi Me²⁺ ionok formájában találhatók. A hőmérséklet csökkenésével a SzV-párok száma a kötési energiájuktól függő mértékben növekszik. Egyidejűleg azonban a szennyező oldékonysága csökken, ami előbb a SzV-párok aggregációját (dimer, trimer stb.), majd Me-halogenid-precipitátumok létrejöttét eredményezi. Az esetek jelentős részében a SzV-párok, SzV-pár-aggregátumok, sőt néha még precipitátumok is egyidejűleg jelen vannak a vizsgált kristályban, és az

² Mivel a diszlokációk mozgását közvetlenül a csúszási síkban működő nyírófeszültségek határozzák meg, a továbbiakban a folyáshatár helyett a belőle egy geometriai faktorról (Kovács és Zsoldos 1965) számítható kritikus csúsztatófeszültséget használok. Ennek megjelölésére a KCsF rövidítést alkalmazom.

egy KCsF-járulékok szétválasztása alig lehetséges. A SzV-párok részaránya növelhető magas hőmérsékleten történő hőkezelést követő edzéssel, de az így kialakult végállapot igen sok tényezőtől függ (Taylor és munkatársai 1981), és az aggregátumok kiküszöbölése csak kis szennyezéstartalom esetén lehetséges (Grau és munkatársai 1980a). Ráadásul maguknak a SzV-pároknak a diszlokációk mozgását akadályozó hatása más mechanizmussal valósul meg alacsony hőmérsékleten, ahol a SzV-párok rögzítettek, mint magasabb hőmérsékleten, ahol forogni, sőt esetleg haladó mozgást végezni is képesek. A problémát tovább bonyolítja, hogy nagyon sok esetben levegőben növesztett kristályokat használnak, amelyekben a kétvegyértékű kation szennyezők hatása lényegesen módosulhat (Grau és munkatársai 1980b; 1. még 1.2 pont).

Mivel munkámban az aggregátumok és precipitátumok folyáshatár növelő szerepével nem foglalkozom, az irodalom áttekintése során igyekeztem kiválasztani azokat a vizsgálatokat, amelyekből valóban a nem aggregált SzV-párok folyáshatár-járulékára vonatkozó információk nyerhetők.

2.2. Mozgásképtelen szennyező—vakancia-párok kritikus csúsztatófeszültség-járuléka

Az egyedülálló, helyhez rögzített SzV-párok folyáshatár növelő hatása a szilárdoldatos keményedés elméletének keretében értelmezhető. Ennek részletes összefoglalását adta nemrégiben Ungár és Honyek (1981), ezért itt csak a kísérleti eredmények értelmezéséhez szükséges legfontosabb összefüggések ismertetésére szorítkozom.

A KCsF járulék számítása két alapvető feladat megoldását teszi szükségessé. Az egyik, hogy milyen a diszlokáció és ponthiba kölcsönhatásából származó erő, a másik, hogy milyen módon kell figyelembe venni a diszlokációval kölcsönhatásban álló sok ponthiba együttes hatását.

Egy ponthiba és a diszlokáció kölcsönhatási energiáját megkaphatjuk a kontinuum elmélet alapján, ha ismerjük a diszlokáció σ_{ij}^D feszültség tenzorát és a ponthiba által okozott rácsstorzulás ε_{ij} dilatációs tenzorát. Ha a feszültség a ponthiba V_H térfogatában állandónak tekinthető, akkor az

$$\bar{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{V_H} \int_{V_H} \varepsilon_{ij} dV \quad (2.2)$$

átlagos dilatációs tenzor bevezetésével a kölcsönhatási energia az

$$U_K = -V_H \sum_{i,j} \sigma_{ij}^D \bar{\varepsilon}_{ij} \quad (2.3)$$

alakba írható (Frank 1967a). A diszlokációra a kölcsönhatás miatt fellépő erő

$$f = \frac{\partial U_K}{\partial x}, \quad (2.4)$$

ahol x a diszlokáció és a ponthiba távolsága a csúszási síkban. Az f erő maga is függ az x távolságtól, így a kölcsönhatásra jellemző $f(x)$ erő-távolság profilt kapunk; amely az elméletben fontos szerepet játszik.

Az egyes ponthibáktól származó erők ismeretében az egyidejűleg sok ponthibával kölcsönhatásban álló diszlokáció mozgatásához szükséges feszültséget (KCsF) az erők megfelelő összegzésével lehet meghatározni. Ha a ponthibák koncentrációja kicsi, akkor feltehető, hogy a diszlokáció mozgását egyidejűleg csak egyetlen ponthiba befolyásolja, és ilyenkor a KCsF-járulékot a *Fleischer* (1964), illetve *Friedel* (1964) által levezetett

$$\tau_F^0 = \frac{f_m^{3/2}}{2bT_L^{1/2}} c_f^{1/2} \quad (2.5)$$

összefüggés adja meg. Itt f_m a diszlokációra egyetlen ponthiba által kifejtett erő maximális értéke (vagyis az erő-távolság profil maximuma), c_f a ponthibák felületi koncentrációja a csúszási síkban, b a Burgers-vektor nagysága, T_L a diszlokáció állandónak tekintett vonalmenti feszültsége. A nagyobb ponthiba-koncentráció esetén is érvényes legsikeresebb átlagolási eljárást *Labusch* (1970, 1972) dolgozta ki. Az eljárás, a *Fleischer*—*Friedel*-módszerrel ellentétben, alkalmas különböző típusú ponthibák (pl. különböző orientációjú SzV-párok) egyidejű jelenléte által okozott KCsF-járulék számítására is. Ha az i -edik típusú ponthiba és a diszlokáció között fellépő erő maximuma f_{mi} , a ponthiba koncentrációja c_{fi} , akkor a *Labusch*-elmélet szerint a KCsF-járulék

$$\tau_L^0 = \frac{w^{1/3}}{b(4IT_L)^{1/3}} \left(\sum_i c_{fi} f_{mi}^2 \right)^{2/3}, \quad (2.6)$$

ahol w a diszlokáció—ponthiba-kölcsönhatás hatótávolságára jellemző paraméter, I numerikus állandó. Kis ponthibakoncentrációra a (2.6) általános összefüggésből *Friedrichs* és *Haasen* (1975) vezetett le egy kifejezést, amely tulajdonképpen a *Fleischer*—*Friedel*-modell többféle hibára történő általánosítása. Eszerint

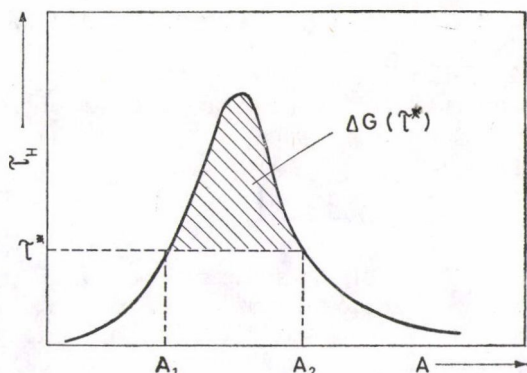
$$\tau_{FL}^0 = \frac{1}{2bT_L^{1/2}} \frac{\sum_i c_{fi} f_{mi}^2}{\left(\sum_i c_{fi} f_{mi} \right)^{1/2}}. \quad (2.7)$$

A fenti elméletek nem veszik figyelembe, hogy a diszlokáció mozgását a termikus aktiváció is segítheti, ezért csak 0 K-en érvényesek. Magasabb hőmérsékleten a KCsF a termikus aktiváció miatt várhatóan csökken.

A KCsF-járulék hőmérsékletfüggésének számításához szükség van a ponthiba által létesített akadály legyőzéséhez szükséges ΔG aktivációs szabad entalpia ismeretére, amely az $f(x)$ erő-távolság profilból kapható meg. A számításhoz a 2.2. ábrán sematikusan feltüntettem egy ponthiba által a diszlokációra kifejtett τ_H feszültségnek a diszlokáció által súrolt A területtől való függését. Ha a diszlokációt τ^* effektív feszültség mozgatja, akkor az aktivációs szabad entalpia az ábrán besatírozott területtel egyenlő (*Kocks és munkatársai* 1975, *Kovács* 1981a):

$$\Delta G = \int_{A_1}^{A_2} (\tau_H - \tau^*) b dA. \quad (2.8)$$

Mint látható, ΔG értéke függ a τ^* effektív feszültségtől, és a (2.8) összefüggés megadja a $\Delta G(\tau^*)$ függvényt. Alkalmazva a deformációsebesség ($\dot{\epsilon}$) szokásos Arrhenius-



2.2. ábra. Az aktivációs entalpia számításához. A τ_H feszültség az $f(x)$ erő-távolság profilból kapható a $\tau_H = f/(lb)$ összefüggéssel (l az elmozduló diszlokációs szakasz hossza), a súrolt terület pedig $A = lx$

összefüggését (Kocks és munkatársai 1975)

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0 \exp\{-\Delta G/kT\} \quad (2.9)$$

és behelyettesítve ide a $\Delta G(\tau^*)$ függvényt, megkapjuk az adott sebességű deformáció létrehozásához szükséges effektív feszültség (τ^*) és a hőmérséklet (T) között fennálló összefüggést

$$\Delta G(\tau^*) = kT \ln(\dot{\epsilon}_0/\dot{\epsilon}). \quad (2.10)$$

Az erő-távolság profil a csúszási síkban elhelyezkedő vagy ahhoz közeli ponthiba esetén a kontinuum elméletben a diszlokáció közvetlen közelében irreális erőértékekhez vezet, ezért a $\Delta G(\tau^*)$ függvényt rendszerint egy önkényesen kiválasztott erő-távolság profilból származtatják, vagy empirikus összefüggéseket használnak (Ono 1968, Kocks és munkatársai 1975).

A kétvegyértékű kation szennyezők KCSF-járulékát alkáli halogenidekben először Fleischer (1962a, 1962b) számította ki. Feltevése az volt, hogy a keményítő hatás a SzV-pároktól származik, amelyeket ún. tetragonális hibának tekintett. A fogalmat Cocharde és munkatársai (1955) vezették be vasba beépült szénatomok folyáshatár-növelő hatásának vizsgálatánál. Tetragonális hiba alatt olyan ponthibát értettek, amelynek a deformációs tere tetragonális szimmetriájú, azaz a hozzá rendelt $\bar{\epsilon}_{ij}$ átlagos dilatációs tenzor két fődilatációja azonos: $\bar{\epsilon}_2 = \bar{\epsilon}_3$. A hiba anizotrópiáját a

$$\Delta \epsilon = \bar{\epsilon}_1 - \bar{\epsilon}_2 \quad (2.11)$$

ún. tetragonalitással jellemezték. Ennek bevezetése azért volt célszerű, mert a ponthiba és a diszlokáció kölcsönhatási energiáját megadó összefüggések explicit módon csak a tetragonalitást tartalmazzák (Cocharde és munkatársai 1955). Míg azonban a vasba rácsközi helyzetbe beépült szénatom valóban tekinthető tetragonális hibának, addig a SzV-pár alkáli halogenidekben nem rendelkezik ilyen szimmetriával. Ennek ellenére a SzV-pár és a diszlokáció kölcsönhatását az irodalomban azóta is a tetra-

gonális hibára érvényes összefüggésekkel tárgyalják, sőt tetragonális hibának is nevezik.

A SzV-párok KCsF-járulékát *Fleischer* a (2.5) összefüggés alapján számította ki, ami csak egyféle hiba esetén érvényes. Ezért a különböző orientációjú és a csúszási síktól különböző távolságra levő SzV-párokat egy egységes $f(x)$ erő-távolság profillal vette figyelembe, amiből a

$$\Delta G(\tau_F) = \Delta G_0 \left[1 - \left(\frac{\tau_F}{\tau_F^0} \right)^{1/2} \right]^2 \quad (2.12)$$

kifejezést kapta (τ_F a deformációhoz szükséges effektív feszültségnek a SzV-párok akadályozó hatásából származó része, azaz a SzV-párok KCsF-járulék, ΔG_0 és τ_F^0 konstansok, amelyek tartalmazzák az f_m erőmaximum-értéket és ezen keresztül a $\Delta \varepsilon$ tetragonalitást). Ebből (2.9) felhasználásával a

$$T_c = \frac{\Delta G_0}{k \ln(\dot{\varepsilon}_0/\dot{\varepsilon})} \quad (2.13)$$

jelöléssel a KCsF-járulék (τ_F) hőmérsékletfüggése a

$$\left(\frac{\tau_F}{\tau_F^0} \right)^{1/2} = 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{1/2} \quad (2.14)$$

alakba írható. Fizikai jelentését tekintve τ_F^0 a KCsF-járulék 0 K-en, T_c pedig az a hőmérséklet, ahol τ_F nullává válik, azaz az akadályok megfelelő ütemű legyőzését egyedül a termikus aktiváció is biztosítani tudja.

A *Fleischer*-féle elméletből a fentiekén kívül számos kísérleti ellenőrzésre alkalmas összefüggés vezethető le. Így megadható a

$$\Delta V = \left(\frac{\partial \Delta G}{\partial \tau^*} \right)_T \quad (2.15)$$

aktivációs térfogatnak (*Kocks és munkatársai* 1975) a τ_F feszültségtől

$$\Delta V(\tau_F) = \frac{\Delta G_0}{\tau_F^0} \left[\left(\frac{\tau_F^0}{\tau_F} \right)^{1/2} - 1 \right] \quad (2.16)$$

és a hőmérséklettől

$$\frac{1}{\Delta V(T)} = \frac{\tau_F^0}{\Delta G_0} \left[\left(\frac{T_c}{T} \right)^{1/2} - 1 \right] \quad (2.17)$$

való függése.

Ezenkívül kiszámítható a diszlokációsebességnek (v) az effektív feszültségtől (τ^*) való függését megadó (pl. *Sprackling* 1976)

$$v = B(\tau^*)^{m^*} \quad (2.18)$$

empirikus összefüggésben szereplő m^* kitevő értéke is (B konstans). Az effektív feszültséget a számított τ_F értékkel azonosítva *Fleischer* (1962b) az

$$m^* = \frac{\Delta G_0}{kT} \left[\left(\frac{\tau_F}{\tau_F^0} \right)^{1/2} - \frac{\tau_F}{\tau_F^0} \right] \quad (2.19)$$

kifejezést kapta.

Később *Gibbs* (1969) észrevette, hogy *Fleischer* (1962b) hibás erő-távolság profilt adott meg, de az általa kijavított összefüggés ugyancsak hibás volt. A helyes kifejezést végül *Barnett* és *Nix* (1973) adta meg. Ez a javítás azonban az eredményeket gyakorlatilag nem változtatta meg.

A *Fleischer*-modell matematikailag igényesebb tárgyalását adta *Frank* (1967a), de a KCSF-járlékre levezetett formulája (*Frank* 1968) — a konstansok értékétől eltekintve — azonos a (2.5) és (2.14) összefüggések egyesítéséből kapható kifejezéssel.

Az elmélet finomítására tett kísérletek közül fontos még a kristály anizotrópiájának figyelembevétele. *Graham* és *Sines* (1966) anizotróp kristályt feltételezve kiszámította az él-, illetve csavardiszlokáció és SzV-pár kölcsönhatási energiáját. Azt találták, hogy az izotróp és anizotróp közelítés gyakorlatilag azonos kölcsönhatási energiát eredményez. Ezzel szemben *Barnett* és *Nix* (1973) csavardiszlokációra elvégzett anizotróp számításai szerint az erő-távolság profil maximuma jelentősen eltérhet az izotróp közelítésből kapott értéktől. Ez az eltérés azonban — mint *Guin* és *Langdon* (1974), illetve *Sprackling* (1976) kimutatta — nem érinti a (2.12)–(2.19) összefüggések alakját, csupán a bennük szereplő konstansok értékét módosítja.

Mitchell és *Heuer* (1977) a kristály-anizotrópia figyelembevételével kiszámította az erő-távolság profil téldiszlokáció esetére is. További módosításuk az volt, hogy a KCSF-járlék (2.5) összefüggésében szereplő vonalmenti feszültséget is meghatározták anizotróp kristályra.

A fenti elméletek végeredményben a *Fleischer*-elmélettel azonos összefüggésekre vezetnek, és csak a KCSF-járlék számszerű értéke dönthetné el helyes vagy hibás voltukat. Ez az út azonban nem járható, hiszen mindegyik tartalmazza a $\Delta\epsilon$ tetragonaritást, ami lényegében illesztési paraméterként szolgál. Meghatározása az elméletnek kísérleti eredményekkel való összehasonlítása alapján történik. Az elmélet különböző változatai alapján különböző tetragonaritás értékeket kaptak. A *Frank* (1968)-féle változatból NaCl:Ca esetén $\Delta\epsilon=0,57$, LiF:Mg esetén $\Delta\epsilon=0,52$ adódott. *Guin* és *Langdon* (1974) a *Barnett* és *Nix* (1973) -féle anizotróp közelítést használva LiF:Mg rendszerre két különböző módszerrel ugyanazon kísérletek alapján $\Delta\epsilon=0,5$ és $\Delta\epsilon=1,6$ értéket kapott. Az eredeti *Fleischer*-féle eredmény ugyanerre a rendszerre $\Delta\epsilon=0,44$ volt. Az összes tökéletesítést tartalmazó változatból *Mitchell* és *Heuer* (1977) $\Delta\epsilon=0,33$ értéket kapott NaCl:Ca esetén és $\Delta\epsilon=0,57$ értéket LiF:Mg esetén.

Chang és *Graham* (1964) megkísérelte a tetragonaritást a mért folyáshatár adatoktól független módszerrel meghatározni NaCl kristályban levő Ca^+ ion—vakancia-pár esetén. A becsléshez a NaCl rácsba bekényszerített koherens CaCl_2 precipitátum által okozott rácsstorzulás becsült nagyságát használták, ami fizikailag nehezen indokolható. Ennek ellenére a kapott $\Delta\epsilon=0,3$ érték közel van az illesztésből meghatározott adatokhoz.

Az elmondottakból kitűnik, hogy az ismertett elmélettel kapcsolatban három alapvető probléma vehető fel. Az egyik a lineáris rugalmassági elméletre alapozott kontinuum modell alkalmazhatóságának korlátozott volta a diszlokáció közvetlen közelében. A másik az, hogy a SzV-pár átlagos dilatációs tenzora ismeretlen. Végül a harmadik, hogy a különböző orientációjú és a csúszási síktól különböző távolságban levő SzV-párok különböző akadályozó centrumként működnek, ezért együttes hatásuk nem számítható egyetlen erő-távolság profillal a (2.5) összefüggés alapján. Ez utóbbi probléma viszonylag könnyen megoldható a SzV-párok egyedi számbavételével és a (2.7) összegző formula alkalmazásával (1. 4.22 pont). Az átlagos dila-

tációs tenzor meghatározása már jóval nehezebb feladat, de közelítő megoldás erre is található (l. 4.41 pont). Ezzel szemben a diszlokáció magjával kapcsolatos probléma a lineáris kontinuum elmélet keretében nem oldható meg. A megoldás elvileg a diszlokáció—ponthiba-kölcsönhatás teljesen atomisztikus tárgyalásától várható (vö. 1.5 pont). Ezt megnehezíti, hogy a diszlokáció és ponthiba kölcsönhatási energiájának távolságfüggését csak az ionok közti kölcsönhatást leíró potenciálfüggvények ismeretében lehet kiszámítani, és a számolás jelentős számítógép kapacitást és nagymennyiségű gépidőt igényel. Egy ilyen számítást ismertet *Puls* (1980b), amelynek során vassal szennyezett MgO kristályban a folyáshatár-növekményért felelős Fe^{3+} ion — kationvakancia — Fe^{3+} ion komplex és éldiszlokáció kölcsönhatását vizsgálta. Az f_m maximális erőre a hiba orientációjától és a használt ion-kölcsönhatási potenciáloktól függően $f_m = 1,2 \cdot 10^{-10}$ N és $f_m = 5,4 \cdot 10^{-10}$ N közötti értékeket kapott. A kísérleti eredmények alapján viszont $f_m = 2 \cdot 10^{-9}$ N adódott. A jelentős eltérés oka *Puls* szerint az, hogy az ion-kölcsönhatási potenciálok nem elég pontosak.

A kontinuum elmélet említett korlátaival függ össze az is, hogy a Fleischer-modellre alapozott elméleti leírás nem lehet perdöntő abban a sokat vitatott kérdésben (*Fleischer* 1962b, *Frank* 1968, *Mitchell* és *Heuer* 1977), hogy a SzV-párok KCsF-járulékában a diszlokációk él- vagy csavarkomponensével való kölcsönhatás játssza a meghatározó szerepet. Azonos feltételek mellett az ismertett elmélet minden változatából nagyobb fékező erő adódik az éldiszlokációra, mint a csavardiszlokációra. Ebből a tényből ered az a következtetés (pl. *Frank* 1968), hogy a KCsF-járulékot a csavardiszlokációk mozgása szabja meg. Ez a következtetés önmagában is vitatható, hiszen a deformációhoz nem elég csak az egyik komponens mozgatása, így a szükséges feszültséget éppen a nehezebben mozgatható komponens — esetünkben az élkomponens — szabja meg (*Kocks* és *munkatársai* 1975). Ettől eltekintve, a fenti elmélet nem alkalmas a kérdés eldöntésére, hiszen kísérleti adatok híján nem tudjuk, hogy a diszlokáció magja közelében az él- és csavardiszlokációra alkalmazhatjuk-e ugyanazokat az illesztési paramétereket.

Ha a *Puls* (1980b) által atomisztikus számítással kapott eredményeket helyesnek fogadjuk el, akkor ebből az következik, hogy az éldiszlokációkra kifejtett fékező erő túl kicsi a mért KCsF-járulék magyarázatához, a döntő szerepet tehát feltehetőleg a csavardiszlokációk játsszák. Sajnos csavardiszlokációkra ilyen jellegű számítás nem ismeretes, de számos kísérleti eredmény (*Sprackling* 1976) mutatja, hogy azonos feszültség mellett a csavardiszlokációk mozgékonyasága kisebb, mint az éldiszlokációké, tehát a fékező feszültség valóban a csavardiszlokációk esetén nagyobb. A kérdés azonban részletesebb vizsgálatot kívánna, mert ez a jelenség elvileg más módon is értelmezhető (pl. lépcsők nemkonzervatív mozgása).

2.3. Forgásképes szennyező—vakancia-párok kritikus csúsztatófeszültség-járuléka

Magasabb hőmérsékleten, ahol a SzV-párok forgásképpé válnak, egy új diszlokáció fékező mechanizmus fellépése várható, amelynek létezését először *Schoeck* (1956) vetette fel. Ez az ún. indukált Snoek-effektus, amelynek lényege az, hogy a diszlokációval kölcsönhatásban álló SzV-párok a rendszer legkisebb energiájú állapotának megfelelő orientációt igyekeznek elfoglalni, és ahhoz, hogy a diszlokációt továbbmozgassuk, a saját maga által létrehozott potenciálvölgyből kell kihúzni.

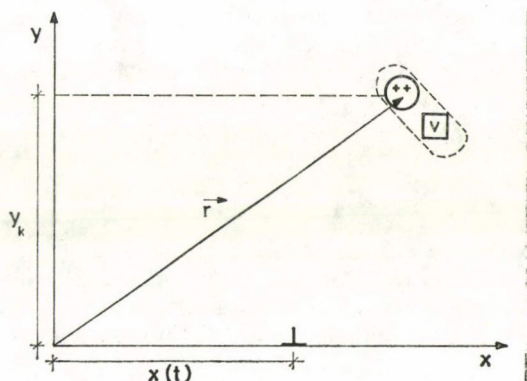
Az indukált Snoek-effektusból származó fékező feszültség első elméleti tárgyalását Schoeck és Seeger (1959) adta. Modelljük azonban egyrészt túl sok egyszerűsítő feltevést tartalmaz, másrészt — mint Hirth és Lothe (1968) megjegyzi — „az elméletben alkalmazott fizikai feltevések nehezen követhetők”. A modell hőmérséklet-független fékezőfeszültséget adott, ami csak nagyon speciális feltételek mellett lehet igaz. Matematikailag pontosabb és kevesebb fizikai egyszerűsítést tartalmaz az elméletnek Frank (1967b) által továbbfejlesztett változata. Ebben az elméletben a fékezőfeszültség magas hőmérsékleten a várakozásnak megfelelően eltűnik, alacsony hőmérsékleten azonban hőmérsékletfüggetlen, ami a jelenségről alkotott fizikai kép- pel nincs összhangban. A KCsF Snoek-járulékára a hőmérsékletfüggetlen tartomány- ban Frank (1968) a

$$\tau_s = \alpha \mu \Delta \varepsilon c_p \quad (2.20)$$

összefüggést kapta (α numerikus szorzó, μ a nyírási modulusz, $\Delta \varepsilon$ a tetragonalitás és c_p a SzV-párok koncentrációja).

Jóval áttekinthetőbb fizikai képre épül a Keszthelyi és munkatársai (1984) által nemrégiben kidolgozott szimulációs módszer,³ amelyet részletesebben ismertetek, mert számításaim során ezt használtam. A módszer a SzV-pár 12 lehetséges orientá- ciója között végbemenő átmenetek számítógépes szimulációján alapul. Az egyik állapotból a másikba történő átmenetet az átmeneti frekvencia (ω) jellemzi, amely az $i \rightarrow j$ átmenetnél az \vec{r} helyvektorú rácspontban levő szennyező ion és az x tengely mentén mozgó, t időben $x(t)$ koordinátájú diszlokáció esetén (2.3. ábra) az

$$\omega_{ij}(t, \vec{r}) = v_r(T) \exp \left\{ \frac{E^i(x(t), \vec{r}) - E^j(x(t), \vec{r})}{2kT} \right\} \quad (2.21)$$



2.3. ábra. A Snoek-effektus modellezésénél használt jelölések

kifejezéssel adható meg. Itt E^i , illetve E^j az i -edik, illetve j -edik állapotban levő SzV-pár és a diszlokáció kölcsönhatási energiája, k a Boltzmann-állandó, T az abszolút hőmérséklet, végül

$$v_r(T) = v_0 \exp \left\{ -\frac{H_r - TS_r}{kT} \right\} \quad (2.22)$$

³ A munkában magam is részt vettem, de a módszert nem tekintem saját eredménynek, ezért az irodalmi áttekintésben ismertetem.

az átmeneti frekvencia a diszlokációtól távol (ν_0 az atomok rezgési frekvenciájával kapcsolatos állandó, H_r és S_r az orientációváltozás aktivációs entalpiája és entrópiája a diszlokációtól távol). A kölcsönhatási energiák ismeretében az ω_{ij} átmeneti frekvenciák tetszőleges \vec{r} és t esetén meghatározhatók.

A szimulációhoz ismerni kell annak $\varphi(t_2|i, t_1)$ integrális valószínűségét, hogy a SzV-pár, amely a t_1 időben az i állapotban van, a t_2 időpontig átmegy egy másik állapotba. Ez a

$$\frac{\partial \varphi(t_2|i, t_1)}{\partial t_2} = [1 - \varphi(t_2|i, t_1)] \sum_{k \neq i} \omega_{ik}(t_2) \quad (2.23)$$

differenciálegyenlet megoldása útján kapható meg. Ezután generálva $\gamma_1 \in [0, 1]$ egyenletes eloszlású véletlenszámot, a t_2 ugrási időpont a

$$\gamma_1 = \varphi(t_2|i, t_1) \quad (2.24)$$

egyenlet megoldásából nyerhető.

Az, hogy a SzV-pár a t_2 időpontban az i állapotból melyik j állapotba megy át úgy határozható meg, hogy a $[0, 1]$ intervallumot a lehetséges 4 közvetlen átmenet feltételes valószínűségének arányában 4 részre osztjuk, és az új állapotot $\gamma_2 \in [0, 1]$ véletlenszámmal jelöljük ki.

A SzV-pár állapotváltozásait a fenti módon szimulálva kiszámítható bármely $i \rightarrow j$ átmenet során disszipált ΔE_i^j energia

$$\Delta E_i^j(t_2, \vec{r}) = E^i(x(t_2), \vec{r}) - E^j(x(t_2), \vec{r}). \quad (2.25)$$

Az időt a $(-\infty, +\infty)$ intervallumban (gyakorlatban egy véges tartományban) változtatva, a diszlokáció elhaladása közben egy SzV-pár által disszipált energia összegyűjthető. A folyamatot különböző kiinduló állapottal sokszor végigjátszva, a csúszási síktól y távolságban lévő egyetlen SzV-pár által disszipált energia átlagos $\overline{\Delta E(y)}$ értéke is meghatározható. Figyelembe véve, hogy a SzV-párok atomi koncentrációja c_p , az y távolságban lévő összes SzV-párok által átlagosan disszipált $W(y)$ energia

$$W(y) = c_p \overline{\Delta E(y)}. \quad (2.26)$$

A teljes disszipált energia a csúszási síktól különböző távolságra levő SzV-párookra történő összegzéssel adódik. Kimutatható, hogy a disszipált energia nagysága megegyezik a diszlokáción végzett munkával, így a diszlokációra ható átlagos erő, ebből pedig a fékező feszültség kiszámítható. A KCsF Snoek-effektusból származó járulékhára végül a

$$\tau_s = \frac{c_p}{Ab} \sum_k \overline{\Delta E(y_k)} \quad (2.27)$$

kifejezést kapjuk, ahol A a csúszási síkban egy kationra jutó terület, y_k pedig a szennyező ionnak a csúszási síktól mért lehetséges távolságait jelenti.

Mint látható, a KCsF-járulék itt is a SzV-párok koncentrációjával arányos, ami a (2.20) Frank-féle összefüggéssel összhangban van. A korábbi számításoktól eltérő az az eredmény, hogy a fékező feszültség mind magas, mind pedig alacsony hőmérsékleten eltűnik, azaz maximuma van a hőmérséklet függvényében. Hasonló jellegű a fékező feszültségnek a diszlokációsebességtől való függése is.

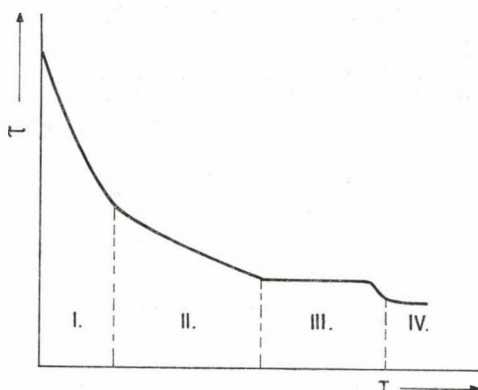
2.4. Kísérleti eredmények

A kísérleti eredmények összefoglalásánál elsősorban a kis szennyezéstartalmú kristályokon végzett vizsgálatokat választottam ki, ahol feltehető, hogy valóban a SzV-párok hatását mérték. A vizsgálatok döntő többsége az $\{110\}$ $\langle 110 \rangle$ csúszási rendszerre vonatkozik, mert a szokásos $\langle 100 \rangle$ irányú összenyomás esetén NaCl típusú rácsban szinte kizárólag ez a csúszási rendszer működik (Sprackling 1976, Alsem és De Hosson 1982). A továbbiakban csak ezzel az esettel foglalkozom.

A kétvegyértékű kation szennyezők KCsF-járulékalával kapcsolatban a leggyakrabban tanulmányozott kérdés a KCsF szennyezéstartalomtól és hőmérséklettől való függése. A SzV-párok KCsF-járulékára vonatkozó elmélet egyéb összefüggéseit csak kevés munka vizsgálja. Még kevesebb az olyan vizsgálat, ahol az elmélettel összevethető effektív feszültséget megméri. Ehelyett az effektív feszültséget legtöbbször a teljes KCsF mért értékéből számítják ki a (2.1) összefüggés alapján, a belső feszültség értékének valamilyen (gyakran irreális) becslésével. Az eredmények összefoglalását a hőmérsékletfüggéssel kezdem, mert ennek ismerete megkönnyíti az eredmények elemzését.

A teljes KCsF hőmérsékletfüggése elegendően kevés szennyezést tartalmazó (esetleg edzett) kristályokban durván egy hőmérsékletfüggő és egy hőmérsékletfüggetlen tartományra osztható: alacsony hőmérsékleten a KCsF a hőmérséklet növelésével csökken, majd egy átmeneti hőmérséklettől kezdve nagyjából állandó marad. Ez a hőmérsékletfüggés összhangban van a rögzített SzV-párok KCsF-járulékára (továbbiakban: Fleischer-járulék) kidolgozott elmélettel, és az átmeneti hőmérséklet durván a Fleischer-járulék eltűnésének T_c hőmérsékletével azonosítható (2.2 pont). T_c pontosabb értékét az effektív feszültség hőmérsékletfüggésének vizsgálatából lehet megkapni. Az említett hőmérsékletfüggést találta Hesse (1967) 90 K és 330 K között végrehajtott mérései során $2 \cdot 10^{-6}$ mol/mol, illetve $2 \cdot 10^{-5}$ mol/mol Ca szennyezést tartalmazó NaCl kristályokban. A kétféle szennyezés esetén az átmeneti hőmérséklet 280 K, illetve 230 K volt. Hasonló eredményeket kapott Guin és Langdon (1974) $7 \cdot 10^{-6}$ mol/mol, illetve $1,5 \cdot 10^{-5}$ mol/mol Mg szennyezést tartalmazó LiF kristályokban. Mérési tartományuk 77–375 K volt. Ők a hőmérséklettől független részt a belső feszültséggel azonosították, és a (2.1) összefüggés alapján kiszámították az effektív feszültséget is; amelynek hőmérsékletfüggésére a Fleischer-elmélettel egyező $(\tau^*)^{1/2} \sim 1 - (T/T_c)^{1/2}$ arányosság adódott. Meghatározták a (2.13) egyenletben szereplő T_c hőmérsékletet is, amelyre $T_c = 420$ K értéket kaptak.

A teljes KCsF hőmérsékletfüggésének mindmáig legteljesebb vizsgálata Skrotzki és Haasen (1981) nevéhez fűződik, akik Sr-mal szennyezett NaCl, KCl, KBr és KJ kristályokon végeztek méréseket igen széles (néhány K-tól 500 K-ig terjedő) hőmérséklettartományban. Vizsgálataik szerint a teljes KCsF négy tartományra osztható, amelyeket sematikusán a 2.4. ábrán mutatok be. (Az említett korábbi mérések lényegében a II. és III. szakaszra korlátozódtak.) Az egyes szakaszok határai kristályonként más és más hőmérsékleten vannak és gyakran nehezen állapíthatók meg. Az I. és II. szakasz határa többnyire 100 K és 200 K közé, a korábban említett átmeneti hőmérséklet (a II. és III. szakasz határa) pedig 200 K és 300 K közé esik. A III. szakasz vége — ahol egyáltalán megfigyelhető — 400 K és 500 K között van. Skrotzki és Haasen saját eredményeik, valamint Suzuki és Kim (1975, 1976) vizsgálatai alapján feltételezték, hogy az I. szakaszban a diszlokációk mozgását elsősorban a Peierls-feszültség szabja meg. A diszlokációk és rögzített SzV-párok kölcsönhatása a II.



2.4. ábra. A kritikus csúsztatófeszültség hőmérsékletfüggésének sémája (Skrotzki és Haasen 1981)

szakaszban válik dominánssá, a KCsF Fleischer-járuléka tehát itt tanulmányozható. Ez a járuléka a hőmérséklet növekedésével fokozatosan eltűnik, és a III. szakaszban a KCsF indukált Snoek-effektusból származó része (továbbiakban: Snoek-járuléka) és a belső feszültség válik meghatározóvá. A IV. szakaszban a belső feszültség az egyedüli összetevő. A hőmérsékletfüggésnek ez a felosztása helytállónak látszik és a kísérleti eredmények elemzésénél igen hasznosnak bizonyult. A továbbiakban ezt a 2.4. ábrán bemutatott felosztást használom.

A kísérleti eredmények elemzése során Skrotzki és Haasen feltételezi, hogy a szennyezett kristályok belső feszültsége megegyezik a tiszta kristályban magasabb hőmérsékleten mérhető teljes KCsF-értékkel. Ezzel szemben Appel (1974) vizsgálatai; amelyekben a belső feszültséget megmérte, azt mutatják, hogy azt jelentősen befolyásolja a szennyezéstartalom is, és értéke a tiszta kristály KCsF értékének többszöröse is lehet. *Uruszovszkaja és munkatársai* (1981) kontrollált szennyezéstartalmú NaCl kristályokban ugyancsak azt találták, hogy a belső feszültség erősen függ a szennyezéstartalomtól. *Skrotzki és Haasen* ennek ellenére az effektív feszültséget úgy határozta meg, hogy a teljes KCsF-értékből levonta a tiszta kristály KCsF értékét. Az így kapott „effektív feszültség” a II. szakaszban az összes kristálynál $(\tau^*)^{1/2} \sim 1 - (T/T_c)^{2/3}$ függést mutatott. Ez az eredmény a SzV-párok folyáshatár-járulékára vonatkozóan nem túl sok információt ad, tekintve, hogy a fenti módon meghatározott feszültség nem azonos az effektív feszültséggel. Emellett mérési pontjaikra ugyanolyan jól illeszthető a $(\tau^*)^{1/2} \sim 1 - (T/T_c)^{1/2}$ görbe is.

Appel (1974) $9 \cdot 10^{-5}$ mol/mol Ca szennyezést tartalmazó NaCl kristályokban feszültségrelaxációs módszerrel megmérte az effektív feszültség hőmérsékletfüggését a II. szakaszban (200–300 K között). A hőmérsékletfüggés a Fleischer-elmélettel egyezésben a $(\tau^*)^{1/2} \sim 1 - (T/T_c)^{1/2}$ összefüggésnek felel meg. Méréseiből a $T_c = 313$ K érték adódott. Ugyancsak a mért effektív feszültség hőmérsékletfüggését adja meg *Tabacsnyikova* (1974) KCl kristályokra a 40 K–300 K hőmérséklet-tartományban. Az I. és II. szakasz határa kb. 65 K-nél volt, a II. szakaszban teljesült a $(\tau^*)^{1/2} \sim 1 - (T/T_c)^{1/2}$ összefüggés, $T_c = 260$ K volt.

A KCsF-nek a szennyezéskonzentrációtól való függését nagyon sokan vizsgálták. A SzV-párok járulékanak meghatározása szempontjából itt a fő problémát az okozza, hogy a szennyezéstartalom növelésével a mért KCsF-értékben a SzV-párok járuléka mellett az aggregátumok, sőt esetleg a precipitátumok hatása is megjelenik. A mérések általános tanulsága az, hogy a τ teljes KCsF-nek a c szennyezéskonzentrációtól való függése a

$$\tau = \tau_0 + \alpha c^n \quad (2.28)$$

összefüggéssel írható le, ahol n értékét leggyakrabban 0,5-nek találták, de 0,5 és 1,0 közötti értékek is előfordulnak (τ_0 és α konstansok). A nagymennyiségű hivatkozás megadása helyett utalok *Sprackling* (1976), illetve *Mitchell és Heuer* (1977) összefoglaló munkájára, ahol ezek megtalálhatók. Itt csak a kis szennyezéstartalmú kristályokon végzett mérésekkel foglalkozom, ahol a szennyezéskonzentráció és a SzV-párok koncentrációja durván azonosnak tekinthető.

A teljes KCsF szobahőmérsékleten kis szennyezéstartalom esetén a szennyezéskonzentrációval lineárisan változik, azaz a (2.28) összefüggéssel adható meg $n=1$ értékkel. Ezt az eredményt kapta *Hesse* (1967) Ca-mal szennyezett, edzett NaCl kristályokban $2 \cdot 10^{-6}$ és $6 \cdot 10^{-5}$ mol/mol közé eső szennyezéskonzentrációk esetén. *Fröhlich és munkatársai* (1976) ugyanilyen kristályokban a lineáris függést egészen $5 \cdot 10^{-4}$ mol/mol szennyezéstartalomig érvényesnek találták. Lineáris összefüggést kapott *Skrotzki és munkatársai* (1978), illetve *Skrotzki és Haasen* (1981) kb. $(1-2) \times 10^{-4}$ mol/mol szennyezéstartalomig NaCl:Ca, NaCl:Sr, KCl:Sr, KBr:Sr és KJ:Sr kristályokban. A lineáris függést erősítik meg *Sárközi és munkatársai* (1982) mérései Mg, Mn, Ca, Ba, Pb és Sr szennyezést tartalmazó NaCl kristályokban ($1,5 \cdot 10^{-4}$ mol/mol szennyezéstartalomig). Mindezek a mérések szobahőmérsékleten történtek, ami a hőmérsékletfüggés III. szakaszába esik, ahol a szennyezések hatása a Snoek-effektusból származik. A kapott lineáris $\tau-c$ összefüggés egyezik a Snoek-járulékra kidolgozott elmélettel (2.3 pont). Sajnos a vizsgálatok egyikében sem mérték meg az effektív feszültséget, ami az eredmények bizonyító erejét jelentősen csökkenti.

A hőmérsékletfüggés II. szakaszában *Skrotzki és munkatársai* (1978), illetve *Skrotzki és Haasen* (1981) végzett méréseket. A NaCl:Sr, KCl:Sr és KJ:Sr kristályokban 77 K-en végzett vizsgálatokban a KCsF a szennyezéstartalom négyzetgyökével arányosan nőtt, azaz a (2.28) összefüggésben az $n=0,5$ értéket találták helyesnek. Ez a függés egyezik a Fleischer-járulékra kapott (2.5) kifejezéssel, de ebben az esetben sem az effektív feszültséget mérték.

Az effektív feszültség koncentrációfüggését vizsgálta *Guiu és Langdon* (1974) LiF:Mg kristályokban szobahőmérsékleten, ami az adott kristálynál a II. tartományba esik. A Fleischer-elmélettel összhangban $\tau^* = \text{konst} \sqrt{c}$ összefüggést kaptak. Ugyanezt állapította meg *Appel* (1974) a mért effektív feszültségre NaCl:Ca kristályokban 223 K-en (II. tartomány). A maximális szennyezés mindkét esetben kb. $1,5 \cdot 10^{-4}$ mol/mol volt.

A KCsF-nek elvileg nemcsak a szennyezéskonzentrációtól, hanem a szennyező típusától is függnie kell, hiszen a különböző kétvegyértékű kation szennyezőt tartalmazó SzV-párok ráctorzító hatása feltehetőleg különböző. Néhány esetben szobahőmérsékleten ezt a kérdést is megvizsgálták összehasonlítva a KCsF különböző szennyezők esetén felvett koncentrációfüggését. Viszonylag nagy koncentrációknál (10^{-4} – $2,5 \cdot 10^{-3}$ mol/mol között) *Chin és munkatársai* (1973) azt találta, hogy NaCl

kristályban a Ca, Sr és Ba szennyezők esetén a KCsF-ben nincs lényeges eltérés, KCl-ben a Ca és Ba szintén azonos KCsF-növekményt okoz, de a Sr szennyező hatása kisebb az előbbieknél, NaBr és KBr esetén pedig a Ca, Sr és Ba szennyezők hatása között nem volt különbség. *Dryden és munkatársai* (1965) NaCl kristályban azonosnak találta az Mn és Ca szennyezők hatását, és — *Chin és munkatársai* eredményével ellentétben — KCl-ben nem talált különbséget az Sr és Ba szennyezők hatása között. A koncentrációtartomány ez esetben is 10^{-4} — $2,5 \cdot 10^{-3}$ mol/mol volt. Ugyanilyen koncentrációnál LiF kristályokban a Ca szennyezés (*Ahlquist* 1974) és a Mg szennyezés (*Reppich* 1972, *Dryden és munkatársai* 1965) hatása azonosnak bizonyult. Ezek a tapasztalatok azt sugallják, hogy a KCsF-járuléka nem függ az SzV-párt alkotó szennyező ion típusától. A viszonylag nagy szennyezéstartalom miatt azonban valószínű, hogy itt a szennyezés hatása nemcsak a SzV-pároktól származik. Ehhez járul még az a körülmény, hogy a kísérleteket szobahőmérsékleten végezték, ahol a SzV-párok KCsF-járuléka kicsi a teljes KCsF-értékhez viszonyítva (kb. 1/5—1/6 része: *Appel* 1974, *Gupta és Li* 1970, *Sprackling* 1973 és 4.1 pont), ami a különböző SzV párok hatásának elkülönítését megnehezíti. Kis szennyezéstartalmaknál ($c < 1,5 \cdot 10^{-4}$ mol/mol) ugyancsak szobahőmérsékleten végzett méréseket *Sárközi és munkatársai* (1982) Mg, Mn, Ca, Sr, Pb és Ba szennyezést tartalmazó NaCl kristályokban. A mérések azt mutatják, hogy a Mg, Mn és Ca szennyezők hatása közel azonos, de egyértelműen nagyobb KCsF-járulékot ad az Sr, Pb és Ba szennyező (utóbbiak járuléka a fenti sorrendben csökken).

A Fleischer-elmélet összefüggéseinek igen alapos kísérleti vizsgálatát végezte el *Guin és Langdon* (1974) LiF:Mg, *Appel* (1974) pedig NaCl:Ca kristályokban. Mindkét esetben az effektív feszültséget határozták meg a hőmérsékletfüggés II. szakaszában. Az effektív feszültség hőmérsékletfüggése mindkét esetben a (2.14) összefüggést, a koncentrációtól való függése pedig a (2.5) összefüggést igazolta (erről a megfelelő helyen már volt szó). Emellett a mérési eredmények jól egyeztek az aktivációs térfogat effektív feszültségtől való függését, illetve hőmérsékletfüggését megadó (2.16), illetve (2.17) összefüggéssel, és igazolták az aktivációs szabad entalpiának az effektív feszültségtől való függésére megadott (2.12) kifejezést is. *Guin és Langdon* a (2.19) összefüggés alapján meghatározta az m^* sebességi exponens hőmérsékletfüggését is, és jó egyezést talált az egyéb módszerekkel (közvetlen elmozdulásmérés, illetve feszültségrelaxáció) kapott értékekkel. *Appel* NaCl:Ca kristályoknál megállapította, hogy a Snoek-effektus hatása 250 K felett észlelhető, és a rögzített SzV-párok járuléka $T_c = 313$ K-en tűnik el.

A mérési eredmények tehát azt mutatják, hogy a Fleischer-elmélet a tetragonális illesztéssel történő meghatározása után a rögzített SzV-párok KCsF-járulékának fő jellegzetességeit helyesen írja le. Ez a járuléka a szobahőmérséklet körül eltűnik, és magasabb hőmérsékleten a szennyezők KCsF-járulékát a feltevés szerint a Snoek-effektus adja. Sajnos ez utóbbira vonatkozóan nincsenek megbízható, az effektív feszültség mérésén alapuló kísérleti eredmények.

IRODALOM

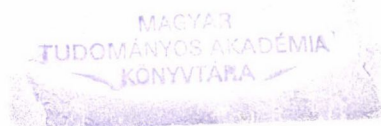
- Ahlquist, C. N.*, Acta Met. 22, 1133, 1974.
Alsem, W. H. M. and de Hosson, J. Th. M., Phil. Mag. A 46, 327, 1982.
Alsic, V. I., Galusztasvili, M. V. i Paperno, I. M., Krisztallografija 20, 1113, 1975.
Andrejev, G. A., Fiz. Tverd. Tela, 7, 183, 1965.
Andronikasvili, E. L. and Galusztasvili, M. V., Phys. Stat. Sol. (b) 116, 335, 1983.

- Appel, F., Phys. Stat. Sol. (a) 25, 607, 1974.
- Barnett, D. M. and Nix, W. D., Acta Met. 21, 1157, 1973.
- Barr, L. W. and Lidiard, A. B., Defects in Ionic Crystals, Physical Chemistry — An Advanced Treatise (Ed. by H. Eyring, D. Henderson and W. Jost), Academic Press, New York, 1970.
- Bassani, F. and Thomson, R., Phys. Rev. 102, 1264, 1956.
- De Batist, R., Van Dingenen, E., Martisev, Ju. N., Szilvesztrova, I. M. i Uruszovszkaja, A. A., Krisztallografija 12, 1012, 1967.
- Bielig, G. A. and Lilley, E., Phil. Mag. A 41, 745, 1980.
- Blisztanov, A. A., Szojfer, Ja. M. i Saszkolszkaja, M. P., Krisztallografija 11, 827, 1966.
- Born, M. and Mayer, J., Z. Phys. 75, 1, 1932.
- Brantley, W. A. and Bauer, C. L., Phys. Stat. Sol. 18, 465, 1966.
- Brissenden, S., Gardner, J. W., Illingworth, J., Kovačević, I. and Whitworth, R. W., Phys. Stat. Sol. (a) 51, 521, 1979.
- Bucci, C., Fieschi, R. and Guidi, G., Phys. Rev. 148, 816, 1966.
- Bucher, M., Phys. Stat. Sol. (b) 114, 383, 1982.
- Caffyn, J. E. and Goodfellow, T. L., Nature 176, 878, 1955.
- Caffyn, J. E. and Goodfellow, T. L., Phil. Mag. 7, 1257, 1962.
- Caffyn, J. E., Goodfellow, T. L. and Hamdani, A. J., Mater. Res. Bull. 2, 1067, 1967a.
- Caffyn, J. E., Goodfellow, T. L. and Hamdani, A. J., Proc. Brit. Ceram. Soc., 9, 147, 1967b.
- Camagni, P., Chiarotti, G. and Manara, A., J. Phys. Chem. Solids 17, 165, 1960.
- Camagni, P. and Manara, A., J. Phys. Chem. Solids 26, 449, 1965.
- Catlow, C. R. A., J. de Phys. 41, C6, 53, 1980.
- Catlow, C. R. A., Faux, I. D. and Norgett, M. J., J. de Phys. 37, C9, 419, 1976.
- Chang, R. and Graham, L. J., Acta Cryst. 17, 795, 1964.
- Chin, G. Y., Van Uitert, L. G., Green, M. L., Zydzik, G. J. and Kometani, T. Y., J. Am. Ceram. Soc. 56, 369, 1973.
- Cocharadt, A. W., Schoeck, G. and Wiedersich, H., Acta Met. 3, 533, 1955.
- Colombo, L., Kataoka, T. and Li, J. C. M., Phil. Mag. A 46, 211, 1982.
- Conrad, H., Mater. Sci. Eng. 6, 265, 1970.
- Davidge, R. W., Phys. Stat. Sol. 3, 1851, 1963.
- Dryden, J. S., Morimoto, S. and Cook, J. S. Phil. Mag. 12, 379, 1965.
- Edner, A., Z. Phys. 73, 623, 1932.
- Eshelby, J. D., Newey, C. W. A., Pratt, P. L. and Lidiard, A. B., Phil. Mag. 3, 75, 1958.
- Faux, I. D. and Lidiard, A. B., Z. Naturforsch. 269, 62, 1971.
- Fischbach, D. B. and Nowick, A. S., Phys. Rev. 99, 1333, 1955.
- Fischbach, D. B. and Nowick, A. S., J. Phys. Chem. Solids 2, 226, 1957.
- Fischbach, D. B. and Nowick, A. S., J. Phys. Chem. Solids 5, 302, 1958.
- Fleischer, R. L., Acta Met. 10, 835, 1962a.
- Fleischer, R. L., J. Appl. Phys. 33, 3504, 1962b.
- Fleischer, R. L., The Strengthening of Metals Ed. by D. Peckner, Reinhold, New York, 1964.
- Frank, W., Z. Naturforsch. 22a, 365, 1967a.
- Frank, W., Z. Naturforsch. 22a, 377, 1967b.
- Frank, W., Phys. Stat. Sol. 29, 391, 1968.
- Frenkel, J., Kinetic Theory of Liquids, Clarendon Press, Oxford, 1946.
- Friedel, J., Dislocations, Pergamon Press, Oxford, 1964.
- Friedrichs, J. and Haasen, P., Phil. Mag. 31, 863, 1975.
- Fritz, B., Anger, J. and Lüty, F., Z. Phys. 174, 240, 1963.
- Fröhlich, F. and Adametz, O., Phys. Stat. Sol. 24, 583, 1967.
- Fröhlich, F. and Hensel, G., Kristall und Technik 8, 327, 1973.
- Fröhlich, F. and Suisky, D., Phys. Stat. Sol. 4, 151, 1964.
- Fröhlich, F., Grau, P. and Suszynska, M., Phys. Stat. Sol. (a) 34, 165, 1976.
- Fröhlich, F., Hensel, G. and Ziller, J., Phys. Stat. Sol. (a) 6, 165, 1971.
- Galusztasvili, M. V., Fiz. Tverd. Tela 12, 1263, 1970.
- Galusztasvili, M. V. i Paperno, J. M., Elektronnue i ionnue processu v tverduh telah VII., Mecniereba, Tbiliszi, 1974.
- Gibbs, G. B., Phil. Mag. 20, 611, 1969.
- McGowan, W. C., Ph. D. Thesis, University of North Carolina at Chapel Hill, 1965. (idézi: Urušovszkaja 1968).
- Graham, L. J. and Sines, G., J. Appl. Phys. 37, 4207, 1966.
- Granzer, F., Wagner, G. and Eisenblätter, J., Phys. Stat. Sol. 30, 587, 1968.

- Grau, P., Dubiel, M. and Berg, G., Phys. Stat. Sol. (b) 98, 265, 1980a.
 Grau, P., Czapelski, M., Berg, G., Klahre, G. and Suszynska, M., Phys. Stat. Sol. (a) 61, 189, 1980b.
 Grosetti, E. and Brescia, G., Nuovo Cim. B 57, 419, 1968.
 Guin, F. and Langdon, T. G., Phil. Mag. 30, 145, 1974.
 Gupta, I. and Li, J. C. M., Mater. Sci. Eng. 6, 20, 1970.
 Gyulai, Z. und Boros, J., Math. naturw. Anz. ungar. Akad. Wiss. 59, 115, 1940.
 Gyulai, Z. und Hartly, D., Z. Phys. 51, 378, 1928.
 Hartmanová, M., Phys. Stat. Sol. (a) 7, 303, 1971.
 Hesse, J., Reinststoffprobleme Bd. 3., Akademie Verlag, Berlin, 1967.
 Hirth, J. P. and Lothe, J., Theory of Dislocations, McGraw-Hill, New York, 1968.
 Hooper, A., nem publikált eredmények, 1971 (idézi: Whitworth 1975).
 Huddart, A. and Whitworth, R. W., Phil. Mag. 27, 107, 1973.
 Huntington, H. B., Dickey, J. E. and Thomson, R., Phys. Rev. 100, 1117, 1955.
 Janszky, J., A diszlokációs terek hatása a ponthibákon lokalizált elektronokra és rezgésekre, Kandidátusi értekezés, Budapest, 1978 (megjelent: Magy. Fiz. Folyóirat XXVII, 411, 1979).
 Jeszenszky, B. and Kiss, J., Z. Phys. 169, 323, 1962.
 Kataoka, T., Sakamoto, M. and Yamada, T., Japan. J. Appl. Phys. 14, 1609, 1975.
 Keszthelyi, T., Kálmán, P., Tóth, A. and Sárközi, J., Mater. Sci. Eng. 64, 197, 1984.
 Kiss, J., Kristallografia 10, 890, 1965.
 Kiss, J., Elektriceszkije effekty pri deformirovanije kamennoj szoli, Kandidátusi értekezés, Moszkva (MGU), 1966.
 Kiss, J., Acta Phys. Hung. 24, 241, 1968.
 Kliewer, K. L. and Kohler, J. S., Phys. Rev. 157, 685, 1967.
 Kocks, U. F., Argon, A. S. and Ashby, M. F., Thermodynamics and Kinetics of Slip, Progress in Materials Science Vol. 19, Pergamon Press, Oxford—London—New York, 1975.
 Kolomijcev, A. I., Fiz. Tverd. Tela 13, 1487, 1971.
 Kovács I., Magy. Fiz. Folyóirat XVIII, 1, 1970.
 Kovács I., Magy. Fiz. Folyóirat XXIX, 187, 1981a.
 Kovács I. (szerkesztő), Szilárdságnövelő mechanizmusok fémekben II., Magy. Fiz. Folyóirat, XXIX, 287, 1981b.
 Kovács I. és Zsoldos L., Diszlokációk és képlékeny alakváltozás, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965.
 Kulicsenko, A. N. i Szmirnov, B. I., Fiz. Tverd. Tela, 23, 1029, 1981.
 Labusch, R., Phys. Stat. Sol. 41, 659, 1970.
 Labusch, R., Acta Met. 20, 917, 1972.
 Lehovec, K., J. Chem. Phys. 21, 1123, 1953.
 Lidiard, A. B., Ionic Conductivity, Handbuch der Physik Vol. XX, Springer Verlag, Berlin, 1957.
 Lidiard, A. B. and Norgett, M. J., Point Defects in Ionic Solids, Computational Solid State Physics (Eds. F. Herman, N. W. Dalton and T. R. Koehler), Plenum Press, New York, 1972.
 Lifsic, I. M. i Geguzin, Ja. E., Fiz. Tverd. Tela 7, 62, 1965.
 Lifshits, I. M., Kosevich, A. M. and Geguzin, Ya. E., J. Phys. Chem. Solids, 28, 783, 1967.
 Mar'isev, Ju. N., Kristallografia, 10, 224, 1965.
 Metag, W., Z. Phys. 78, 363, 1932.
 Mitchell, T. E. and Heuer, A. H., Mater. Sci. Eng. 28, 81, 1977.
 Mügge, O., Neues Jb. Mineral 1889 (1), 131, 1889.
 Ono, K., J. Appl. Phys. 39, 1803, 1968.
 Politov, N. G., Galusztasvili, M. V. i Paperno, I. M., Fiz. Tverd. Tela 12, 2421, 1970.
 Pratt, P. L., konferencián elhangzott hozzászólás, 1961 (idézi: Whitworth 1975).
 Puls, M. P., Phil. Mag. A 41, 353, 1980a.
 Puls, M. P., J. de Phys. 41, C6, 135, 1980b.
 Puls, M. P. and So, C. B., Phys. Stat. Sol. (b) 98, 87, 1980.
 Puls, M. P., Woo, C. H. and Norgett, M. J., Phil. Mag. 36, 1457, 1977.
 Remaut, G. and Vennik, J., Phil. Mag. 6, 1, 1961.
 Reppich, B., Acta Met. 20, 557, 1972.
 Reusch, E., Pogg. Ann. 132, 441, 1867.
 Royce, B. S. H. and Smoluchowski, R., Phys. Rev. 122, 1125, 1961.
 Rueda, F., Phil. Mag. 8, 29, 1963.
 Rueda, F. and Dekeyser, W., Phil. Mag. 6, 359, 1961.
 Rueda, F. and Dekeyser, W., Acta Met. 11, 35, 1963.
 Sárközi, J., Tóth, A., Orbán, K. and Kálmán, P., Acta Phys. Hung. 53, 81, 1982.

- Schoeck, G., Phys. Rev. 102, 1458, 1956.
 Schoeck, G. and Seeger, A., Acta Met. 7, 469, 1959.
 Schönfeld, H., Z. Phys. 75, 442, 1932.
 Seeger, A., Kristallplastizität, Handbuch der Physik Vol. VII/2, Springer Verlag, Berlin, 1958.
 Seitz, F., Phys. Rev. 80, 239, 1950.
 Seitz, F., Rev. Mod. Phys. 23, 328, 1951.
 Seitz, F., Adv. Phys. 1, 43, 1952.
 Shine, M. C. and McCrone, R. C., Phys. Rev. 176, 1076, 1968.
 Skrotzki, W. and Haasen, P., J. de Phys. 42, C3, 119, 1981.
 Skrotzki, W., Steinbrech, R. and Haasen, P., Mater. Sci. Eng. 32, 55, 1978.
 Spencer, O. S. and Plint, C. A., J. Appl. Phys. 40, 168, 1969.
 Sprackling, M. T., Phil. Mag. 27, 265, 1973.
 Sprackling, M. T., The Plastic Deformation of Simple Ionic Crystals, Academic Press, London—New York—San Francisco, 1976.
 Stepanow, A. W., Z. Phys. 62, 730, 1933.
 Strumane, R. and De Batist, R., Phys. Stat. Sol. 6, 817, 1964.
 Sutter, P. H. and Nowick, A. S., J. Appl. Phys. 34, 734, 1963.
 Suzuki, T. and Kim, H., J. Phys. Soc. Japan 39, 1566, 1975.
 Suzuki, T. and Kim, H., J. Phys. Soc. Japan 40, 1703, 1976.
 Svidkovszkij, E. G., Tyapunyina, N. A. and Belozeroва, E. P., Krisztallografija 7, 471, 1962.
 Tabachnikova, E. D., Kristall und Technik 9, 1187, 1974.
 Tarján I., Magy. Fiz. Folyóirat XXV, 41, 1977.
 Taylor, A. and Pratt, P. L., Phil. Mag. 3, 1051, 1958.
 Taylor, G. C., Strutt, J. E. and Lilley, E., Phys. Stat. Sol. (a) 67, 263, 1981.
 Tharmalingam, K., J. Phys. Chem. Solids 25, 255, 1964.
 Tóth, A., Phys. Stat. Sol. (a) 33, K47, 1976.
 Tóth, A. and Kiss, J. L., Phys. Stat. Sol. (a) 19, K61, 1973.
 Tóth, A., Sárközi, J. and Voszka, R., Periodica Polytechnica, Elec. Eng. 16, 205, 1972.
 Turchányi, Gy., Janszky, J., Mátrai, M. and Tarján, I., Phys. Stat. Sol. 38, K35, 1970.
 Turchányi, Gy., Janszky, J., Mátrai, M. i Tarján, I., Krisztallografija 17, 426, 1972.
 Turchányi, Gy., Janszky, J., Mátrai, M. i Tarján, I., Materiali V. Vseszsojuznoj konferencii po mehanohimii i mehanomissii, Tallin, 199, 1977.
 Turchányi, Gy., Mátrai, M., Janszky, J. and Tarján, I., J. de Phys. 34, C9, 261, 1973.
 Turchányi, Gy., Mátrai, M. i Tarján, I., Krisztallografija 13, 717, 1968.
 Turchányi, Gy. and Tarján, I., Acta Phys. Hung. 28, 291, 1970.
 Turner, R. M. and Whitworth, R. W., Phil. Mag. 21, 1187, 1970.
 Tyler, W. W., Phys. Rev. 86, 801, 1952.
 Tyapunyina, N. A. i Kolomijcev, A. I., Krisztallografija 18, 868, 1973.
 Ungár T. és Honyek Gy., Magy. Fiz. Folyóirat XXIX, 299, 1981.
 Urusovszkaja, A. A., Uszpehi Fiz. Nauk 96, 39, 1968.
 Urusovszkaja, A. A., Darinskaya, E. V., Voszka, R. and Janszky, J., Crystal Research and Technology 16, 597, 1981.
 Whitworth, R. W., Phil. Mag. 11, 83, 1965.
 Whitworth, R. W., Phil. Mag. 15, 305, 1967.
 Whitworth, R. W., Phil. Mag. 17, 1207, 1968.
 Whitworth, R. W., Phys. Stat. Sol. (b) 54, 537, 1972.
 Whitworth, R. W., J. de Phys. 34, C9, 243, 1973.
 Whitworth, R. W., Adv. Phys. 24, 203, 1975.
 Whitworth, R. W., Phys. Stat. Sol. (a) 38, 299, 1976a.
 Whitworth, R. W., J. de Phys. 37, C7, 340, 1976b.
 Whitworth, R. W., Semiconductors and Insulators 3, 403, 1978.
 Whitworth, R. W. and Glen, J. W., Trans. Brit. Ceram. Soc. 62, 731, 1963.
 Yoshinaga, H. and Morozumi, S., Phil. Mag. 23, 1367, 1971.
 Zagorujko, N. V., Krisztallografija 11, 425, 1966.
 Zagorujko, N. V., Szavenko, V. I. i Bekkauer, N. N., Zsurnal Ekszp. i Teor. Fiz., Piszma v red. 14, 283, 1971.
 Zuev, L. B., Gromov, V. E., Narozsnij, A. N. i Carev, O., Fiz. Tverd. Tela 16, 471, 1974.
 Zuev, L. B. and Sergeev, V. P., Phys. Stat. Sol. (a) 63, K119, 1981.

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó és Nyomda főigazgatója
Műszaki szerkesztő: Sándor István
A kézirat a nyomdába érkezett: 1986. március. — Terjedelem: 9,8 (A/5) ív
86-1230 — Szegedi Nyomda — Felelős vezető: Surányi Tibor igazgató



Ára: 40 Ft
Előfizetés kötetenként: 120 Ft

ISSN 0025—0104

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Buka Ágnes:</i> Dielektromos permittivitás és dipolrelaxáció nematikus és szmektikus folyadék-kristályokban	389
<i>Groma István:</i> Szilárdtestek adhéziója	449
<i>Tóth András:</i> Mozgó diszlokációk és ponthibák kölcsönhatása egyszerű ionkristályokban, I. ...	465

307.226

IV.

9
h^o

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

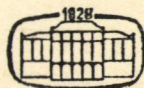
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXIV. KÖTET

6. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1986

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló ellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet
1444 Budapest VIII., Postafiók 263.

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 90 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21, (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32, (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetésnek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölgék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, síma fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

MOZGÓ DISZLOKÁCIÓK ÉS PONTHIBÁK KÖLCÖNHATÁSA EGYSZERŰ IONKRISTÁLYOKBAN, II.*

SAJÁT EREDMÉNYEK

TÓTH ANDRÁS

Budapesti Műszaki Egyetem Fizikai Intézet Kísérleti Fizika Tanszék, 1521 Budapest

TARTALOM

3. Mozgó diszlokációk és kation vakanciák kölcsönhatása	502
3.1. Kísérleti vizsgálatok	503
3.1.1. A pontbenyomat-módszer modellje	503
3.1.2. A diszlokációtöltés mérésének kísérleti technikája	508
3.1.2.1. Minták	508
3.1.2.2. A töltésmérő berendezés	509
3.1.2.3. Benyomat- és rozetta-adatok mérése	510
3.1.2.4. Az ionvezetőképesség mérése	510
3.1.2.5. Elektronmikroszkópos vizsgálatok	512
3.1.3. A diszlokációtöltés mérésének menete és a mérési módszer ellenőrzése	513
3.1.4. A diszlokációk által szállított töltés eredetének kísérleti vizsgálata	516
3.1.4.1. Az anion szennyezés hatása a mérési eredményekre	516
3.1.4.2. A szennyezés állapotváltozásainak hatása a diszlokációtöltésre	517
3.1.4.3. A diszlokációtöltés és a kationvakanciák koncentrációjának kapcsolata ..	523
3.1.5. A Gyulai—Hartly-effektus mérése	524
3.1.5.1. A mérési módszer	525
3.1.5.2. Kísérleti eszközök	527
3.1.6. A Gyulai—Hartly-effektus eredetének kísérleti vizsgálata	528
3.2. Mozgó diszlokációk által okozott töltéstranszport számítása	530
3.2.1. A diffúziós modell	531
3.2.1.1. A számítási módszer általános leírása	531
3.2.1.2. Töltéstranszport nagy diszlokációsebességnél	534
3.2.1.3. A diszlokációk és kation vakanciák kölcsönhatása	534
3.2.2. A diffúziós modell alkalmazásai	537
3.2.2.1. A számítási módszer numerikus vizsgálata	537
3.2.2.2. A diszlokációtöltés sebességfüggése	539
3.2.2.3. A diszlokációtöltés függése a kation vakanciák koncentrációjától	541
3.2.2.4. A szállított töltés fékező hatása a diszlokációra	542
4. Mozgó diszlokációk és szennyező—vakancia-párok kölcsönhatása	543
4.1. A szennyező—vakancia-párok kritikus csúsztatófeszültség-járulékának kísérleti vizsgálata	544
4.1.1. Az effektív feszültség mérése	544
4.1.1.1. A mérési módszer	544
4.1.1.2. Kísérleti technika	547
4.1.2. Az effektív feszültség függése a szennyező típusától	548
4.2. A szennyező—vakancia-párok kritikus csúsztatófeszültség-járulékának számítása	552
4.2.1. Diszlokáció és szennyező—vakancia-pár kölcsönhatási energiája	552
4.2.1.1. A szennyező—vakancia-pár körüli ionelmozdulások	553
4.2.1.2. A szennyező—vakancia-párt jellemző dilatációs tenzor	558
4.2.1.3. A kölcsönhatási energia számítása	559

* Érkezett 1984. május 28. Kandidátusi értekezés, I. rész: megjelent M. F. F. 34, 1986.

4.22. Rögzített szennyező—vakancia-párok kritikus csúsztatófeszültség-járuléka	561
4.23. Forgásképes szennyező—vakancia-párok kritikus csúsztatófeszültség-járuléka . . .	562
4.24. A számítási módszer alkalmazásai	562
4.241. Különböző szennyezőt tartalmazó szennyező—vakancia-párok dilatációs tenzorai	563
4.242. Szennyező—vakancia-párok kritikus csúsztatófeszültség-járuléka 0 K-en . .	564
4.243. Szennyező—vakancia-párok kritikus csúsztatófeszültség-járulékanak hő- mérsékletfüggése	567
4.244. Szennyező—vakancia-párok Snoek-járulékanak függése a szennyező típu- sától	569
Összefoglalás	570
Köszönetnyilvánítás	572
Irodalom	573

3. MOZGÓ DISZLOKÁCIÓK ÉS KATION VAKANCIÁK KÖLCÖNHATÁSA

Számos tapasztalat támasztja alá azt a feltevést, hogy a Szytepanov-effektust és a Gyulai—Hartly-effektus legjelentősebb összetevőjét töltött diszlokációk mozgása okozza (1. fejezet). A diszlokációk töltésükre úgy tesznek szert, hogy útjuk során töltött ponthibákat szednek fel, amelyek a diszlokációkkal együtt mozognak.

Ha a fenti feltevések helyesek, akkor a diszlokációk által szállított töltés és a kristályban jelenlevő felszedhető töltött ponthibák — esetünkben kation vakanciák — mennyisége között összefüggésnek kell lenni. Az irodalomban azonban ezt a kérdést nem vizsgálták meg szisztematikusan. Ennek oka az, hogy a kísérleteket többnyire kontrollálatlan körülmények között előállított kristályokon végezték, amelyeknek szennyezéstartalma tisztázatlan volt. Az ilyen kristályokon végzett mérések egymásnak ellentmondó eredményekhez vezettek (1.2. pont), ami a vakanciák szerepének vizsgálatát lehetetlenné tette. Kísérleti munkám egyik célja a kation vakanciák szerepének tisztázása volt. A méréseket egy általam kifejlesztett és sokoldalúan ellenőrzött módszerrel, kontrollált szennyezéstartalmú kristályokon végeztem.

Kísérleti munkám másik része a Gyulai—Hartly-effektushoz kapcsolódik. Az effektus számos jellegzetességét értelmezni lehet *Whitworth* (1975, 1976) modelljével, amely szerint a vezetőképesség növekedését az elektromos térnek a töltött diszlokáció mozgására gyakorolt hatása okozza (1.4. pont). Az elmélet kísérleti ellenőrzése azonban néhány vonatkozásban hiányos, ezért egy új mérési módszerrel ellenőriztem a *Whitworth*-elméletből a vezetőképesség változására kapott összefüggést.

A diszlokációk és kation vakanciák kölcsönhatásával kapcsolatos elméleti munkám azzal az alapvető problémával függ össze, hogy az említett kvalitatív képet leszámítva hiányzott a diszlokációk által okozott töltéstranszportot akár csak részben is értelmező elmélet (1.3. pont). Ennek oka egyrészt a kísérleti eredmények említett bizonytalansága, másrészt a töltésszállítás igen bonyolult, összetett volta. A felhalmozott kísérleti eredmények alapján kidolgoztam egy olyan fizikai modellt, amelynek segítségével a legfontosabb kísérleti tapasztalatok értelmezhetők.

3.1. Kísérleti vizsgálatok

A diszlokációk által szállított töltés eredetének vizsgálatához az 1.2. pontban ismertetett mérési módszerek közül a pontbenyomat-módszert választottam, mivel ez alkalmas a plasztikus deformáció folyamatában kialakuló viszonyok tanulmányozására, és egyszerűsége folytán nagyszámú mérés elvégzését teszi lehetővé. A módszernek az irodalomban leírt változatait (*McGowan* 1965, *de Batist* és *munkatársai* 1967) azonban felülvizsgáltam, és tökéletesítettem, továbbá kidolgoztam a mérés fenomenológiai elméletét, amely az eredmények pontosabb kiértékelését és magának a módszernek sokoldalú ellenőrzését teszi lehetővé (3.11.—3.13. pont). A mérések során a kristályban levő szennyezések mennyiségének, minőségének és állapotának változtatásával változtattam a szabad kation vakanciák mennyiségét és több oldalról is megvizsgáltam a diszlokációtöltés és a kation vakanciák száma közötti összefüggést (3.14. pont).

A diszlokációmozgás által okozott vezetőképesség változást értelmező *Whitworth*-féle modell ellenőrzéséhez egy új mérési módszert dolgoztam ki (3.15. pont), amellyel a jelenséget a kristályban végbemenő kúszás közben vizsgáltam (3.16. pont).

3.11. A pontbenyomat-módszer modellje

A pontbenyomat-módszernél (1.2. pont) a diszlokációk által a benyomattól elvitt Q_d össztöltés és az egységnyi hosszúságú diszlokációs szakasz által szállított q töltés (továbbiakban: diszlokációtöltés) közötti összefüggést *De Batist* és *munkatársai* (1967) határozták meg ((1.11) egyenlet). A Q_d kiszámítására szolgáló hibás eljárásukat sztatikus állapotot feltételezve korábban korrigáltam (*Tóth* és *Kiss* 1973). Most a mérési folyamatnak egy általánosabb, időfüggést is feltételező leírását adom meg, s csak az általános tárgyalás végén térek ki a sztatikus esettel kapcsolatos kérdésekre.

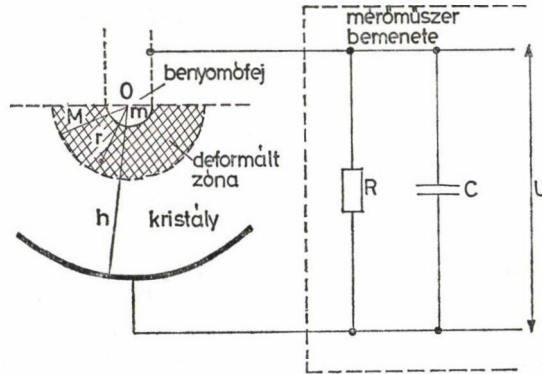
A kristályban lejátszódó elektromos folyamatokat a

$$\operatorname{div} \vec{D} = \varrho \quad (3.1)$$

$$\operatorname{div} \vec{j} = -\frac{\partial \varrho}{\partial t} \quad (3.2)$$

egyenletek írják le (\vec{D} az elektromos eltolás, ϱ a töltéssűrűség, \vec{j} az áramsűrűség, t az idő). A tárgyalandó probléma szigorúan véve háromdimenziós, bizonyos elhanyagolásokkal azonban (amelyeknek jogosságát a kísérleti ellenőrzés dönti el) a feladat egyszerűsíthető.

A mérőrendszer a kristályból, a hozzá csatlakozó elektródákból és a külső áramkörből áll. Ezt a rendszert a számolás egyszerűsítése érdekében a 3.1. ábrán látható leegyszerűsített modellel helyettesítem. Feltételezem, hogy az elektródarendszer gömbszimmetrikus: a benyomófej m sugarú gömb (m a benyomat mindenkor mélysége), a földelt elektróda pedig h sugarú gömbhéj. Feltételezem továbbá, hogy a benyomófej által deformált tartományt a kristály belsejében egy M sugarú gömbfelület határolja. A fenti közelítések alapján feltehető, hogy a kristályban kialakuló töltéssűrűség és az elektromos tér is gömbszimmetrikus, és csak az O origótól mért sugártól



3.1. ábra. A mérőrendszer modellje

(az ábrán r) függ. Ekkor a probléma megoldására a (3.1)–(3.2) egyenletek gömbi polárkoordinátákba átírt, csak r és t változókat tartalmazó

$$\frac{2}{r} D(r, t) + \frac{\partial}{\partial r} D(r, t) = \varrho(r, t) \quad (3.3)$$

$$\frac{2}{r} j(r, t) + \frac{\partial}{\partial r} j(r, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \varrho(r, t) \quad (3.4)$$

változatát használhatjuk.

A (3.3) egyenletet idő szerint differenciálva és a fenti két egyenletből $\partial \varrho / \partial t$ -t kiküszöbölve az áramsűrűség és az elektromos eltolás között fennálló

$$\left[j(r', t) + \frac{\partial}{\partial t} D(r', t) \right] \frac{2}{r'} + \frac{\partial}{\partial r'} \left[j(r', t) + \frac{\partial}{\partial t} D(r', t) \right] = 0 \quad (3.5)$$

differenciálegyenletet kapjuk. Az egyenletet m -től r -ig r' szerint integrálva

$$j(r, t) + \frac{\partial}{\partial t} D(r, t) = \left[j(m, t) + \frac{\partial}{\partial t} D(m, t) \right] \frac{m^2}{r^2}. \quad (3.6)$$

Mivel a benyomófej ideális vezető $\partial D(m, t) / \partial t = 0$, másrészt $j(m, t)$ a külső körben folyó $I_k(t)$ árammal kifejezhető

$$j(m, t) = \frac{I_k(t)}{2\pi m^2} \quad (3.7)$$

és így a (3.6) egyenlet a

$$j(r, t) + \frac{\partial}{\partial t} D(r, t) = \frac{I_k(t)}{2\pi r^2} \quad (3.8)$$

alakba írható.

Felhasználva még, hogy a kristály belsejében folyó áram a diszlokációk által léterhozott $j_d(r, t)$, és az ionvezetésből származó $j_v(r, t)$ áramból áll

$$j(r, t) = j_d(r, t) + j_v(r, t) \quad (3.9)$$

és a vezetési áram kifejezhető a radiális $E(r, t)$ elektromos térerősséggel és a γ vezető-képességgel

$$j_v(r, t) = \gamma E(r, t) \quad (3.10)$$

továbbá, hogy

$$D(r, t) = \varepsilon_0 \varepsilon_r E(r, t) \quad (3.11)$$

az alábbi összefüggésre jutunk:

$$j_d(r, t) + \gamma E(r, t) + \varepsilon_0 \varepsilon_r \frac{\partial}{\partial t} E(r, t) = \frac{I_k(t)}{2\pi r^2}. \quad (3.12)$$

A diszlokációk által okozott $j_d(r, t)$ áramsűrűségről sajnos nincs elegendő információ. Feltéve azonban, hogy a diszlokációk által a benyomófejnél injektált töltés és a deformált zóna másik határolófelületén ugyanannyi idő alatt kilépő töltés nagysága azonos, a

$$j_d(r, t) = \frac{1}{2\pi r^2} \frac{dQ_d(t)}{dt} \quad (3.13)$$

összefüggést használhatjuk. Ezt a (3.12) egyenletbe beírva, m és h között r szerint integrálva (jelölések a 3.1. ábrán), felhasználva, hogy a mérés körülményei között $m \ll h$, továbbá, hogy $j_d(r, t)$ csak az (m, M) intervallumban különbözik nullától, végül, hogy a térerősség integrálja a potenciálkülönbséget adja, rendezés után kapjuk

$$\frac{M-m}{M} \frac{dQ_d(t)}{dt} - 2\pi m \gamma U(t) - 2\pi m \varepsilon_0 \varepsilon_r \frac{dU(t)}{dt} = I_k(t). \quad (3.14)$$

Másrészt a külső körben

$$I_k(t) = \frac{1}{R} U(t) + C \frac{dU(t)}{dt}, \quad (3.15)$$

ahol R és C a mérőműszer bemenetének ellenállása, illetve kapacitása (3.1. ábra). Így (3.14) és (3.15) alapján a rendszert leíró egyenlet

$$(C + 2\pi m \varepsilon_0 \varepsilon_r) \frac{dU(t)}{dt} + \left(\frac{1}{R} + 2\pi \gamma m \right) U(t) = \frac{M-m}{M} \frac{dQ_d(t)}{dt}. \quad (3.16)$$

Mivel esetünkben $C \gg 2\pi m \varepsilon_0 \varepsilon_r$, a (3.16) egyenlet a következőképpen egyszerűsödik:

$$C \frac{dU(t)}{dt} + \left(\frac{1}{R} + 2\pi \gamma m \right) U(t) = \frac{M-m}{M} \frac{dQ_d(t)}{dt}. \quad (3.17)$$

A (3.17) egyenlet a külső körben mért U feszültség és a diszlokációk által elvitt Q_d össztöltés közötti kapcsolatot adja meg. Számunkra azonban a q diszlokációtöltés és az U feszültség közötti összefüggés ismerete szükséges. Ehhez a q és Q_d kapcsolatát megadó (1.11) összefüggés felhasználásával juthatunk el, amelyből

$$Q_d = \frac{\sqrt{2} \alpha q m l}{b}. \quad (3.18)$$

Felhasználva még, hogy az általam használt benyomatmélységek mellett méréseim tanúsága szerint (3.123. pont, 3.3. ábra) a rozettahossz (l) arányos a benyomat mélységével (m)

$$l = \eta m \quad (3.19)$$

azt kapjuk, hogy

$$Q_d = \frac{\sqrt{2} \alpha q \eta m^2}{b}. \quad (3.20)$$

A mérés során a benyomófej egyenletes v_0 sebességgel halad, vagyis

$$m = v_0 t, \quad (3.21)$$

ami egyben Q_d időfüggését is meghatározza

$$Q_d(t) = \frac{\sqrt{2} \alpha \eta v_0^2 q}{b} t^2. \quad (3.22)$$

Behelyettesítve ezt a kifejezést a (3.17) alapegyenletbe, a differenciálás elvégzése után

$$C \frac{dU(t)}{dt} + \left(\frac{1}{R} + 2\pi m \gamma \right) U(t) = \frac{2\sqrt{2} \alpha \eta v_0^2 q (M - m)}{Mb} t. \quad (3.23)$$

Ebből (1.9), (3.19) és (3.21) felhasználásával, rendezés után U -ra az alábbi differenciálegyenletet kapjuk:

$$C \frac{dU(t)}{dt} + \left(\frac{1}{R} + 2\pi v_0 \gamma t \right) U(t) = \frac{2\sqrt{2} (\alpha \eta - 1) v_0^2 q}{b} t. \quad (3.24)$$

Végül bevezetve az

$$A = \frac{1}{RC} \quad (3.25)$$

$$B = \frac{2\pi \gamma v_0}{C} \quad (3.26)$$

$$K = \frac{2\sqrt{2} (\alpha \eta - 1) v_0^2}{bC} \quad (3.27)$$

jelöléseket, az egyenlet az alábbi egyszerű alakra hozható:

$$\frac{dU(t)}{dt} + (A + Bt)U(t) = Kqt. \quad (3.28)$$

A benyomás folyamatát az egyenletnek az $U(0)=0$ kezdeti feltételhez tartozó megoldása írja le

$$U(t, q) = Kq \exp \left\{ - \int_0^t (A + Bt') dt' \right\} \cdot \int_0^t t' \exp \left\{ \int_0^{t'} (A + B\tau) d\tau \right\} dt'. \quad (3.29)$$

Az exponensben szereplő integrálás elvégzése után

$$U(t, q) = Kq \exp \left\{ - \left(At + \frac{B}{2} t^2 \right) \right\} \cdot \int_0^t t' \exp \left\{ At' + \frac{B}{2} t'^2 \right\} dt'. \quad (3.30)$$

Az időfüggés helyett (3.21) segítségével az m benyomatomélységtől való függésre áttérve ($m = v_0 t$)

$$U(m, q) = \frac{Kq}{v_0^2} \exp \left\{ - \left(\frac{A}{v_0} m + \frac{B}{2v_0^2} m^2 \right) \right\} \cdot \int_0^{m/v_0} m' \exp \left\{ \frac{A}{v_0} m' + \frac{B}{2v_0^2} m'^2 \right\} dm'. \quad (3.31)$$

A (3.30), illetve (3.31) összefüggések átrendezésével a q diszlokációtöltés meghatározására alkalmas kifejezéseket kaphatunk, amelyből a benyomás kezdetétől számított tetszőleges t időpillanatban, illetve tetszőleges m benyomatomélység esetén a hozzátartozó U feszültség ismeretében kiszámítható a diszlokációtöltés értéke. A mérés pontosságának növelése érdekében azonban adott minta esetén nem egyetlen U értékből számoltam a diszlokációtöltést, hanem kísérletileg felvettem az $U(m)$, illetve $U(t)$ függvényt, és q értékét az elméleti és a kísérleti feszültségfüggvény illesztéséből határoztam meg (3.13. pont).

A benyomófej megállása után a kristály ionvezetése miatt a kialakult feszültség megszűnik. Ha a benyomás időtartama t_B volt, akkor (3.23)-ból az $m = v_0 t_B$ helyettesítéssel és a jobb oldali forrástagban $v_0 = 0$ figyelembevételével a lecsengési folyamatra érvényes egyenlet

$$\frac{dU(t)}{dt} + (A + Bt_B) U(t) = 0. \quad (3.32)$$

Ennek megoldása az $U(0) = U_0$ kezdeti feltétellel

$$U(t) = U_0 \exp \{ - (A + Bt_B) t \}. \quad (3.33)$$

A (3.30) és (3.31) összefüggések az alábbi ismertetendő, szobahőmérsékleten végzett mérések (3.14. pont) esetében egyszerűbb alakba írhatók. Szobahőmérsékleten és a mérésnél alkalmazott időtartamok mellett ugyanis érvényes, hogy $A \gg Bt$ és $At \ll 1$, s ezzel a (3.30) és (3.31) egyenletek a következő alakot öltik:

$$U \approx \frac{1}{2} Kq t^2, \quad (3.35)$$

illetve

$$U \approx \frac{1}{2} Kq \frac{m^2}{v_0^2}. \quad (3.36)$$

Ha (3.35)-be beírjuk K (3.27) alatti kifejezését és alkalmazzuk a (3.22) összefüggést, akkor a Q_d ossztöltés és a mért feszültség között az

$$U = \frac{Q_d}{C} \frac{\alpha\eta - 1}{\alpha\eta} \quad (3.37)$$

összefüggést kapjuk.

A fenti modell kísérleti ellenőrzésére több lehetőség van. Az egyik legegyszerűbb a szobahőmérsékletre érvényes (3.35)–(3.36) összefüggés vizsgálata, amely szerint adott minta esetén a mért U feszültség arányos a t idő-, illetve az m benyomatmélység négyzetével. Egy másik lehetőség a (3.37) összefüggés ellenőrzése, amely szerint adott kristály és benyomatmélység esetén a mért U feszültség fordítva arányos a műszer bemenő kapacitásával. Végül lehetőség van a lecsengést megadó (3.33) összefüggésnek a mérésekkel történő összehasonlítására. Ezekről az ellenőrző vizsgálatokról a 3.13. pontban lesz szó.

3.12. A diszlokációtöltés mérésének kísérleti technikája

A diszlokációtöltés mérése, a kristályban levő szennyező állapotának nyomonkövetése és a vakanciakonzentráció meghatározása számos mérési módszer alkalmazását kívánja meg. Az eredmények szempontjából emellett alapvető szerepe van a használt mintáknak. A kísérleti technika ismertetését ez utóbbiakkal kezdem.

3.12.1. Minták

A kísérletek során használt minták minden esetben NaCl egykristályok voltak, amelyeket — néhány kivételtől eltekintve — az MTA Kristályfizikai Kutató Laboratóriumban állítottak elő, az általuk kidolgozott speciális módszerrel (*Voszka és munkatársai* 1966, 1970, *Raksányi és Voszka* 1969). Ezzel a módszerrel nagyon tiszta vagy az igényeknek megfelelően szennyezett, OH^- -mentes egykristályokat állítottak elő, így a méréseket olyan kristályokon végezhettem, amelyek gyakorlatilag csak szándékosan bevitt szennyezőt tartalmaztak.

A szennyezetlen kristály maradék szennyezéstartalma (ami NaCl esetén gyakorlatilag kétvegyértékű kation szennyezést jelent) kisebb volt, mint $2 \cdot 10^{-7}$ mol/mol. Az általam használt szándékosan szennyezett kristályok kétvegyértékű kation szennyezőket (Mg, Mn, Ca, Sr, Ba és Pb) tartalmaztak. Az olvadékból jelenlevő szennyezéstartalmak 10^{-6} és 10^{-3} mol/mol között változtak. A kristályba beépült pontos szennyezéstartalomra az esetek többségében nem volt szükség, ezért ezt rendszerint nem határoztam meg. Ezekben az esetekben a minta jellemzésére megadott szennyezéstartalom az olvadékból jelenlevő mennyiséget jelenti. Ahol azonban szükséges volt, ott a kristály szennyezéstartalmát az ionvezetésből, illetve atomabszorpciós spektrofotométerrel határoztam. Ha erről a megmért szennyezéstartalomról van szó, arra a továbbiakban külön utalok.

Az esetek döntő többségében a fent leírt jó minőségű kristályokat használtam. Ez alól kivétel a kontrollálatlan szennyezéstartalom hatásának bemutatására szolgáló példa (3.141. pont), amikor olyan kristályokat vizsgáltam, amelyeket Tanszékünkön a hagyományos Kyropoulos-módszerrel (pl. *Tarján és Mátrai* 1972) levegőben állítottak elő. Erre a körülményre a megfelelő helyen külön felhívom a figyelmet.

A mérésekhez a kristálytömbből derékszögű hasáb alakú mintákat hasítottam az $\{100\}$ hasadási síkok mentén. Csak frissen hasított és sima felületű mintákat használtam.

A minták mérete a különböző vizsgálatoknál más és más volt:

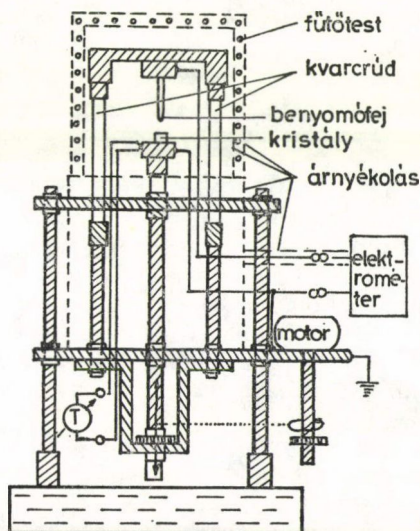
- töltésmérésnél az alapterület $\approx 7 \times 5 \text{ mm}^2$, a magasság 0,5—6 mm leggyakrabban $\approx 5 \text{ mm}$,
- vezetőképesség-mérésnél legtöbbször $\approx 4 \times 4 \times 6 \text{ mm}^3$,
- az elektronmikroszkópos vizsgálatoknál többnyire $\approx 7 \times 10 \text{ mm}^2$ alapterület, 1—2 mm vastagság,
- a Gyulai—Hartly-effektus mérésénél az alapterület $\approx 4 \times 4 \text{ mm}^2$, a magasság 4—6 mm.

Több esetben végeztem méréseket hőkezelt kristályokon. A hőkezelés során a kristály vákuumban ($\approx 0,1 \text{ Pa}$) vagy száraz N_2 atmoszférában volt. Az edzések a kis hőtehetlenségű hőkezelő kályha kikapcsolásával történtek; a hűtés sebessége maximum 100 K/perc volt. Az alkalmazott hűtési sebességek mellett a hűtés a mintákban plasztikus deformációt nem hozott létre (Sárközi 1975). A minták méretre hasítása a hőkezelés után történt.

3.122. A töltésmérő berendezés

A diszlokációtöltés méréséhez szükséges benyomatot a kristályok egyik $\{100\}$ felületén acélgúlóval hoztam létre, melynek geometriai adatai a Vickers-féle keménységmérő gúlóval jó közelítéssel megegyeztek (csúcsszöge $136,4$ fok volt, míg a Vickers-gúlóé 136 fok). Bár a gúlának a kristályhoz viszonyított orientációja az eredményeket alig befolyásolja, a reprodukálhatóság érdekében a benyomatot mindig úgy készítettem, hogy a gúla alapnégyzetének átlója $\langle 100 \rangle$ irányba mutatott.

A reprodukálható benyomatok létrehozására és a keletkező feszültség mérésére szolgáló berendezés vázlata a 3.2. ábrán látható. A benyomófej két kvarcrúdhoz



3.2. ábra. A diszlokációtöltés mérésére szolgáló berendezés vázlata

mereven csatlakozó fém tartón helyezkedik el, a kvarcrudak másik vége pedig a berendezés talpazatához csatlakozik. A kvarcrudak biztosítják a szigetelést a benyomófej és a kristályt tartó földelt elektróda között. Ez utóbbi lényegében egy fémrúd, amely villamos motorral — fogaskerék áttételen keresztül — függőleges irányban mozgatható. Ily módon a rúd és vele együtt a minta, $v_0 = 5 \mu\text{m/s}$ sebességgel mozgott a benyomófej felé. A motor és a fémrúd kapcsolata oldható, így a fémrúd a rajta levő kristállyal együtt kézzel is állítható.

Az elektromos árnyékolás céljából az egész berendezést földelt fémház veszi körül, amelynek felső része a minták kezelése céljából külön levehető. Ez a felső fémburkolat dupla falú, s a falak között a minta melegítésére alkalmas elektromos fűtőtest helyezkedik el. A minta hőmérsékletét a földelt elektródához rögzített termoelem méri.

A benyomófejről induló vezeték — földelt fémcsőben vezetve — a feszültségmérő műszer bemenetére csatlakozik. Feszültségmérő műszerként VAJ—52 típusú rezgőkondenzátoros elektrométer szolgál. Az elektrométerhez vonalíró csatlakozik, amely a keletkező jel időbeli változását felrajzolja.

A mérés a fent leírt berendezéssel úgy történik, hogy a mintát kézzel a benyomófej közvetlen közelébe emeljük, majd a motorral tovább mozgatjuk, amíg a benyomófej behatol a kristályba, és a feszültség eléri egy előre meghatározott értéket. Ekkor a motort leállítjuk, s a mintát leengedjük. Egy kb. $7 \times 5 \text{ mm}^2$ területű mintán 6—8 különböző méretű benyomatot készítünk (a benyomató méretéről a mért feszültség tájékoztat). A benyomató pontos méretének meghatározása utólag történik.

3.123. Benyomató- és rozetta-adatok mérése

A benyomató méretének meghatározása mikroszkóppal (csavaros okulármikrométerrel) történt. Irodalmi adatok (Bojarszkaja 1972) és saját ellenőrző méréseim szerint a benyomató oldalhossza és mélysége között fennáll az acélgúla megfelelő adatai közötti arányosság, ezért csak a benyomató oldalhosszait mértem meg, s ezek H átlagából a benyomató m mélységét az

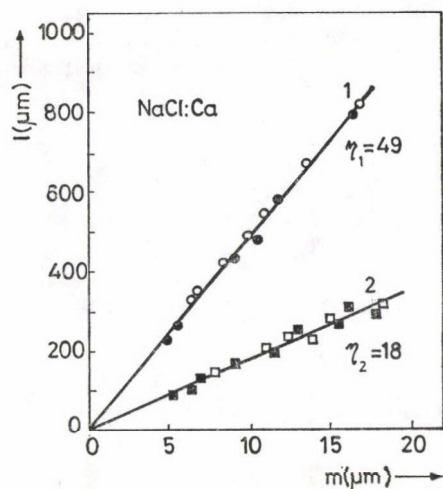
$$m = \frac{H}{5,0} \quad (3.38)$$

összefüggés segítségével számítottam ki.

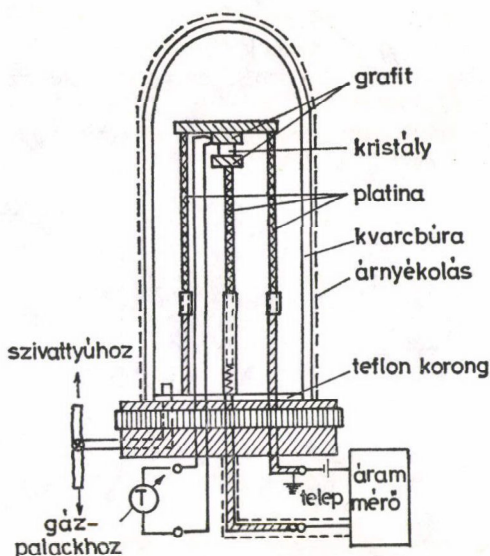
A benyomató körüli diszlokációs rozetta „előhívása” a Mendelson (1961) által kidolgozott módszerrel, FeCl_3 tartalmú ecetsavval történt (1.2. pont, 1.5. ábra). A rozettaágak hosszát mikroszkóppal mértem, és l rozettahosszként a négy ág hosszának átlagát tekintettem. A 3.3. ábrán két különböző mennyiségű Ca szennyezést tartalmazó kristályból készített 3-3 mintán mért rozettahosszakat ábrázoltam a benyomató mélységének függvényében. Látható, hogy a (3.19) lineáris összefüggés jól teljesül.

3.124. Az ionvezetőképesség mérése

A kristályban levő szabad kation vakanciák koncentrációját az ionvezetőképességből határoztam meg. A vezetőképesség mérése az Ohm-törvény alapján történt, de mivel a minták ellenállása igen nagy (elérheti a $10^{17} \Omega$ értéket is), speciális mérő-



3.3. ábra. A rozettahossz (l) és a benyomattélység (m) összefüggése $1-10^{-5}$ mol/mol, illetve $2-10^{-3}$ mol/mol Ca szennyezött tartalmú kristályból készített minták esetén (a különböző jelek különböző mintákat jelölnek)



3.4. ábra. A vezetőképesség mérésére szolgáló berendezés vázlata

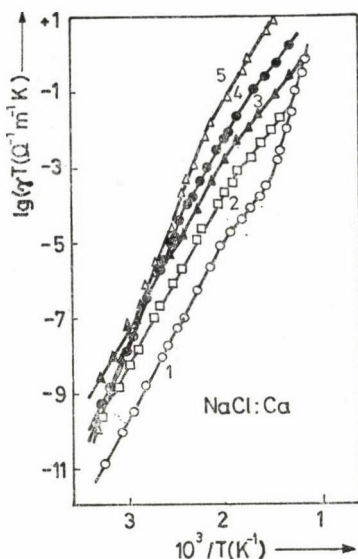
berendezésre van szükség. A mintát megfelelően szigetelt elektródák közé, vákuumban vagy inert gázban kell elhelyezni, s az áram mérése is csak speciális árammérővel lehetséges.

A minta elhelyezésére és az elektródák bevezetésére szolgáló edény vázlata és a mintatartóhoz csatlakozó mérőkör sémája a 3.4. ábrán látható. A minta grafit elektródák között helyezkedik el, az elektródákhoz csatlakozó vezetékek felső, melegített térbe benyúló része platinából készült. A szigetelés biztosítása érdekében az elektromos csatlakozások kivezetése az edényből teflonkorongon keresztül történt. A mintatartót egy kívülről árnyékolt kvarccső veszi körül, amely a fém talpazathoz tömítéssel csatlakozik, s benne légritka tér hozható létre. Az edény egy csap segítségével szivattyúhoz vagy gázpalackhoz csatlakoztatható és tűszelep segítségével gázzal feltölthető. A gáz nyomása az edényben higanyos manométerrel mérhető.

Az áram mérése VAJ-51.1S típusú rezgőkondenzátoros elektrométerrel történt. A legkisebb mérhető áram 10^{-15} A volt, ami eléggé nagy (de maximum 100 V) feszültség és megfelelő minta geometria esetén szobahőmérsékleten is lehetővé tette a mérést.

Mivel a vezetőképesség értékeire különböző hőmérsékleteken szükségünk van, másrészt a hőmérsékletfüggés felvétele egyúttal a mérés ellenőrzésére is szolgál, a minta melegítéséről is gondoskodni kell. Ezt egy henger alakú ellenálláskályha biztosítja, amely ráhúzható a kvarccsőre. A minta hőmérsékletét Pt-PtRh termoelemmel mértem. A hőmérsékletfüggés mérésénél a minta hőmérsékletét maximum 3 K/perc sebességgel változtattam.

Különböző mennyiségű Ca szennyezőt tartalmazó NaCl minták vezetőképességének (γ) hőmérsékletfüggése (T) látható a 3.5. ábrán a szokásos $\lg(\gamma T) - 1/T$ diagramban. A görbék jellege megfelel az irodalmi tapasztalatoknak (l. pl. *Lidiard* 1957, *Fuller* 1972), beleértve a 4 és 5 görbék alacsony hőmérsékleti szakaszának eltérő jellegét is, ami a szennyezés precipitációjával függ össze (pl. *Hartmanová* 1971, *Sárközi* és *Tóth* 1977).



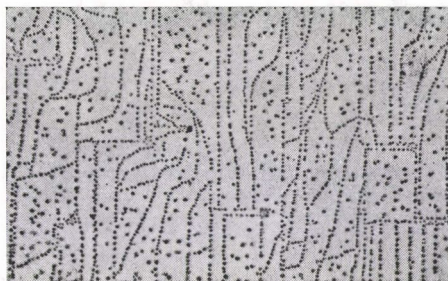
3.5. ábra. Különböző mennyiségű Ca szennyezést tartalmazó NaCl kristályok vezetőképességének hőmérsékletfüggése. Az olvadékba bevitt szennyezés mol/mol-ban: 1 — szennyezetlen, 2 — 10^{-6} , 3 — 10^{-4} , 4 — 10^{-3} , 5 — 10^{-2}

3.125. Elektronmikroszkópos vizsgálatok

A szennyezés állapotváltozásainak nyomonkövetése érdekében elektronmikroszkópos vizsgálatokat is végeztem az ún. aranydekorációs módszer (*Bethge* 1962) segítségével. Ennek lényege az, hogy a kristály felületére vákuumban aranyat párologtatva az arany szemcsék a felületi lépcsőket és a precipitátumokat kirajzolják („dekorálják”). A dekorációs képet azonban nem közvetlenül vizsgáljuk, hanem az arany felvétele után — ugyancsak vákuumpárologtatással — szénhártyát viszünk fel a felületre, majd a kristályt leoldva ezt a dekoráló arany szemcséket hordozó szénhártyát világítjuk át elektronmikroszkóppal.

A párologtatás Balzers MIKRO BA3 típusú gőzölőben, a dekorált szénhártya vizsgálata és fényképezése Tesla BS 500 típusú elektronmikroszkópban történt.

A 3.6. ábrán bemutatok két jellegetes aranydekorációs felvételt.



3.6. ábra. Aranydekorációs felvétel szennyezetlen (a) és Sr-mal szennyezett (b) NaCl egykristály felületéről. A fekete pontok arany szemcsék, a vonallá rendeződött szemcsék felületi lépcsőket rajzolnak ki. A szennyezett mintáról készült felvételen látható foltok a szennyezés kiválásával létrejött precipitátumok (a nagyítás: 35 000-szeres)

3.13. A diszlokációtöltés mérésének menete és a mérési módszer ellenőrzése

A diszlokációtöltést a magasabb hőmérsékleten fellépő problémák (1.2. pont) elkerülése végett mindig szobahőmérsékleten határoztam meg.

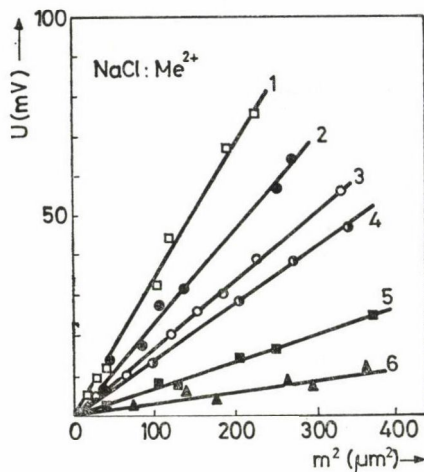
A mérési pontosság növelése érdekében minden minta esetén az alábbi eljárást alkalmaztam:

- a frissen hasított mintán 6—8 különböző mélységű benyomatot készítettem, s megmértem az egyes végállapothoz tartozó U feszültséget,
- optikai mikroszkóppal megmértem a benyomatok oldalhosszait, és ebből meghatároztam a benyomatok m mélységét,
- kémiai maratással előhívtam a diszlokációs rozettákat, és optikai mikroszkóp segítségével meghatároztam az egyes benyomatokhoz tartozó l rozettahosszat,
- a mért rozettahosszakokat ábrázoltam a benyomat mélységének függvényében, majd a mérési pontokhoz egyenest illesztettem, és meghatároztam az η arányossági tényezőt ((3.19) összefüggés),
- végül a mért feszültségeket ábrázoltam a benyomatmélység négyzetének függvényében, és a pontokhoz egyenest illesztve a (3.36) összefüggésből meghatároztam a diszlokációk által szállított q töltés értékét.

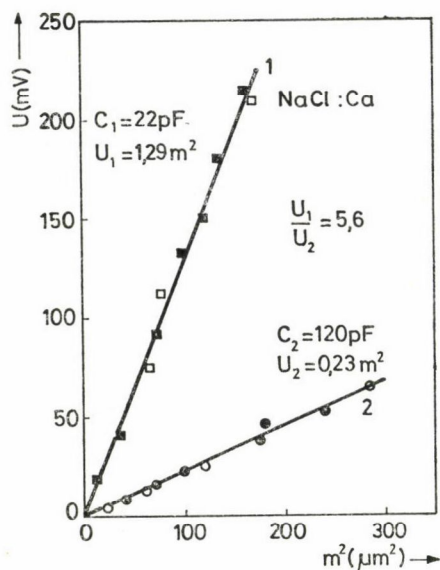
Ily módon a mérési módszer egyik ellenőrzését is elvégeztem, hiszen az $U-m^2$ grafikon felvétele során kiderült, hogy igaz-e a mérés modelljéből kapott (3.36) összefüggés. A 3.7. ábrán néhány különböző szennyezést tartalmazó mintán bemutatom a mért eredményeket. Mint látható, a pontok megfelelnek az

$$U = K'm^2 \quad (3.39)$$

összefüggésnek, azaz igazolják a modell alapján kapott (3.36) eredményt.



3.7. ábra. A feszültség (U) benyomatomélységtől (m) való függése szennyeztelen és különbözőképpen szennyezett NaCl kristályokban. A szennyezések az olvadékban: 1 — 10^{-4} mol/mol Ca, 2 — 10^{-5} mol/mol Ca, 3 — 10^{-3} mol/mol Ca, 4 — 10^{-6} mol/mol Mg, 5 — 10^{-3} mol/mol Sr, 6 — szennyeztelen kristály



3.8. ábra. Az $U-m^2$ összefüggés $C_1=22$ pF és $C_2=120$ pF bemenőkapacitásánál NaCl kristályból készített minták esetén. A mérésnél használt kristály 10^{-6} mol/mol Ca szennyezést tartalmazott. A különböző jelölések különböző mintákat jelölnek

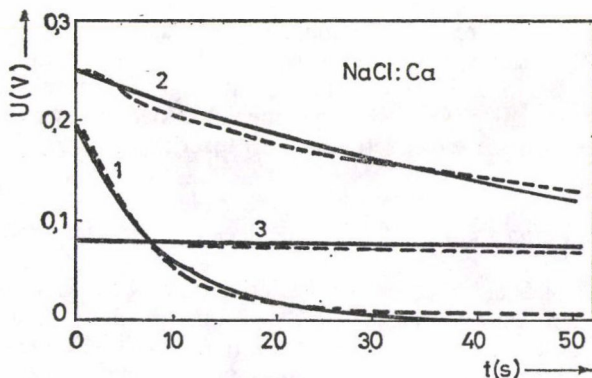
Külön mérési sorozatot végeztem a (3.37) összefüggés ellenőrzésére. Ugyanazon kristályból készült mintákon felvettem az $U-m^2$ grafikont különböző műszer-bemenőkapacitások esetén. A 3.8. ábrán $C_1=22$ pF és $C_2=120$ pF bemenőkapacitással mért eredményeket ábrázoltam 10^{-6} mol/mol Ca szennyezőt tartalmazó minták esetén. A mérési pontok itt is jól közelíthetők a (3.39) összefüggéssel, és az

$$\frac{U_1}{U_2} = \frac{K'_1}{K'_2} \quad (3.40)$$

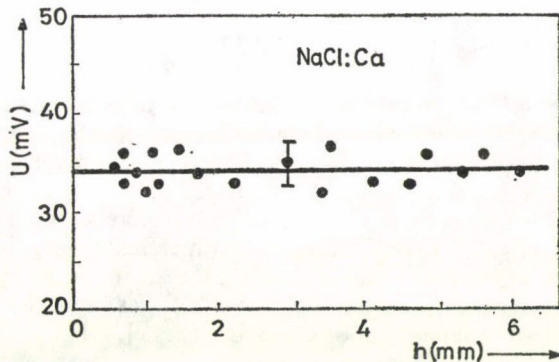
hányados értéke 5,6, ami jól egyezik a

$$\frac{C_2}{C_1} = 5,5 \quad (3.41)$$

értékkel. A mérések tehát igazolják a modellből levezetett (3.37) összefüggést is.



3.9. ábra. Lecsengési görbék 10^{-5} mol/mol Ca szennyezést tartalmazó NaCl mintákban $T=200^\circ\text{C}$ -on (1), $T=157^\circ\text{C}$ -on (2) és $T=25^\circ\text{C}$ -on (3). A szaggatott vonal mérési eredményt, a kihúzott vonal a (3.33) összefüggéssel számolt eredményt mutat



3.10. ábra. Azonos benyomattélységnél ($m=10\ \mu\text{m}$) mért U feszültség függése a minta h magasságától 10^{-4} mol/mol Ca szennyezést tartalmazó NaCl kristályban

A következő ellenőrző vizsgálat a benyomás befejezése utáni lecsengést megadó (3.33) összefüggéssel kapcsolatos. Ehhez szobahőmérséklet feletti hőmérsékleteken is kellett méréseket végezni, mert szobahőmérsékleten — a modellel összhangban — alig van lecsengés. A mérés során regisztráltam az U feszültséget a t idő függvényében mind a benyomás, mind pedig a lecsengés időtartama alatt. Ezután a (3.33) összefüggésből kiszámítottam a lecsengési görbét, s összevetettem a regisztrált lecsengéssel. Az eredményt $T=200^\circ\text{C}$, $T=157^\circ\text{C}$ és $T=25^\circ\text{C}$ hőmérsékleteken egy-egy benyomat esetén a 3.9. ábrán mutatom be. A modell alapján számított (kihúzott vonal) és a mért (szaggatott vonal) lecsengési görbék jól egyeznek.

Végül még egy mérésorozatot végeztem annak eldöntésére, hogy a mért feszültség függ-e a minta h magasságától. Ilyen függés nem túl alacsony (néhány tized mm-nél magasabb) minták esetén a modell alapján nem várható, de mivel Galusztasvili (1970) ilyen jelenséget tapasztalt, ezt a kérdést is megvizsgáltam. A 3.10. ábrán látható

szobahőmérsékleten mért eredmény a modellt igazolja, hiszen az azonos anyagból készült minták esetén azonos benyomatmélységnél kapott U feszültség a mérési hiba határain belül $h=0,5$ mm és $h=6$ mm között független a minta magasságától.

Összefoglalva megállapítható, hogy a mérések kiértékelésére használt mérés-modell helyességét az összes elvégzett ellenőrző kísérlet alátámasztja.

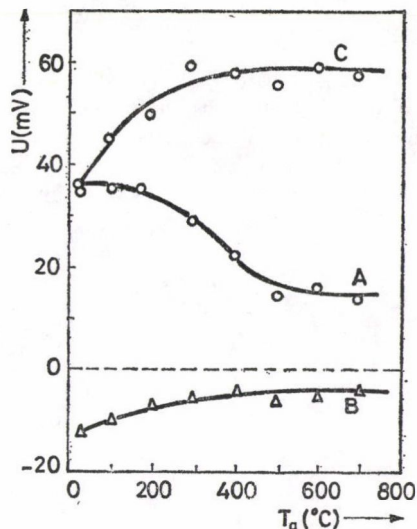
3.14. A diszlokációk által szállított töltés eredetének kísérleti vizsgálata

A diszlokációtöltéssel kapcsolatos kísérleti eredményeim a kitűzött cél szerint három csoportba sorolhatók. Első célkitűzésem az volt, hogy az anion szennyezőt tartalmazó kristályok vizsgálatával bemutassam a kontrollált szennyezéstartalmú, OH^- -mentes kristályok használatának fontosságát. Második mérésorozatom célja a hőkezelés — és a szennyezés ezzel kapcsolatos állapotváltozásai — által okozott diszlokációtöltés-változások vizsgálata és értelmezése volt. Végül harmadik célkitűzésem a diszlokációtöltés és a kristályban levő kation vakanciák mennyisége közti összefüggés közvetlen vizsgálata volt.

3.14.1. Az anion szennyezés hatása a mérési eredményekre

Az 1. fejezetben már kitértem a diszlokációtöltés mérésével kapcsolatos nehézségekre. Az ellentmondó irodalmi eredmények részben a mérési technikák bonyolultságával, részben pedig a használt kristályok eltérő minőségével és előéletével kapcsolatosak. Annak illusztrálására, hogy különböző szennyezésű és előéletű kristályok azonos mérési módszer esetén is igen különböző eredményeket adhatnak, háromféle (A , B és C -vel jelölt) kristályon végeztem méréseket, megvizsgálva a hőkezelés hatását is. Az A jelölés analitikai tisztaságú alapanyagból levegőben növesztett, a B jelölés analitikai tisztaságú alapanyagból NaOH szennyezéssel növesztett, végül a C jelölés extrém tiszta alapanyagból Ca szennyezéssel, OH^- -mentesen növesztett kristályt jelent.

A mérést megelőzően a háromféle kristályból készített mintákat először egy T_a hőmérsékleten néhány órán át temperáltam, majd a kályhából kivéve, szobahőmérsékletre hűtöttem. Ezután benyomatokat készítve megmértem a létrejött U feszültségeket. A mérést különböző T_a hőmérsékletekkel megismétltem, majd az azonos benyomatmélységhez tartozó U feszültségeket ábrázoltam a T_a hőmérséklet függvényében (3.11. ábra). Mint látható, a hőkezeletlen állapotban az OH^- -val szennyezett B kristályon mért feszültségnek nemcsak a nagysága, de az előjele is eltér a többitől, ami azt jelenti, hogy a diszlokációk a B kristályban pozitív, az A és C kristályban pedig negatív töltést szállítanak. Az, hogy az anion szennyezők a töltés előjelét megváltoztatják, már korábban is ismert volt (1.2. pont), az ábrán látható eredmények azonban ezen túl azt is mutatják, hogy a hőkezelés még tovább bonyolíthatja a képet. A hőkezelés a csak Ca szennyezőt tartalmazó C kristályban növeli, míg a B kristályban és a kezdeti állapotban a C -vel azonosnak mutató A kristályban csökkenti az U feszültség abszolút értékét. A C kristály viselkedése a szennyezés magasabb hőmérsékleten bekövetkező oldódásával és az oldott állapotnak a lehűlésnél történő befagyásával magyarázható, az A és B kristály viselkedése azonban alig érthető. Minthogy e két utóbbi kristály abban tér el a C -től, hogy bennük anion szennyezés



3.11. ábra. A benyomatnál létrejött feszültség (U) a temperálás hőmérsékletének (T_a) függvényében különbözőképpen előállított kristályokban. A kristály: analitikai tisztaságú alapanyagból levegőn növesztve, B kristály: analitikai tisztaságú alapanyagból NaOH szennyezéssel növesztve, C kristály: különlegesen tiszta alapanyagból Ca szennyezéssel, OH^- -mentesen növesztve

van, a jelenség bizonyára ezzel függ össze, de az anion szennyezéssel kapcsolatos folyamatok részletei mind ez ideig nem tisztázottak (1.2. pont). A bemutatott bonyodalmak elkerülése végett további méréseimnél a 3.121. pontban említett OH^- -mentes, kontrollált szennyezéstartalmú kristályokat használtam.

3.142. A szennyezés állapotváltozásainak hatása a diszlokációtöltésre

Ha a diszlokáció töltése valóban a kation vakanciák felszedése útján jön létre, akkor a kristály kétvegyértékű kation szennyezésének állapotváltozásai feltehetőleg a diszlokációtöltés változását eredményezik. Ennek oka az, hogy kétvegyértékű kation szennyezőt tartalmazó NaCl kristályokban szobahőmérsékleten a kation vakanciák száma gyakorlatilag megegyezik az oldott állapotban levő szennyező ionok számával. Ezért, ha a kristályban megfelelő hőkezeléssel aggregációs, illetve oldódási folyamatokat idézünk elő, akkor az oldott szennyező ionok számának változásával változni fog a szabad kation vakanciák száma is.

A vizsgálatokhoz Sr-mal szennyezett NaCl kristályokat használtam, amelyekben a Sr tartalom olyan nagy volt (10^{-3} mól/mól), ami messze túlhaladja a szobahőmérsékleten egyensúlyi állapotban oldódó mennyiséget. Mivel az oldhatóság a hőmérséklettel nő, különböző hőmérsékleteken történő temperálással az oldott szennyező

mennyisége változtatható, s szobahőmérsékletre edzéssel ez az állapot befagyasztható.

A töltés mérése mindig szobahőmérsékleten történt. Ennek oka az, hogy a diszlokációk által szállított töltés a hőmérséklettől is függ, ezért a mérési eredményeket csak azonos mérési hőmérséklet esetén tudjuk összehasonlítani. A szobahőmérséklet választását az indokolja, hogy itt a szennyezés hőkezeléssel létrehozott állapota hosszú ideig fennmarad, és emellett a mérés is szobahőmérsékleten a legegyszerűbb.

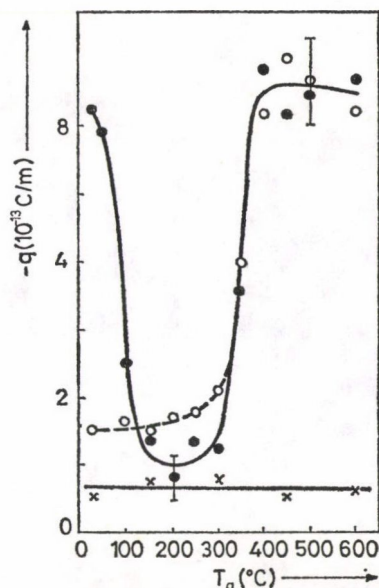
A szennyezés állapotváltozásait elektronmikroszkópos vizsgálatokkal és egy egyszerű kinetikai modellel követtem nyomon. A kinetikai modell egyben lehetőséget adott a vakanciakoncentráció változásainak a mért töltésváltozásokkal való összevetésére is.

A méréseket kétféle kiinduló állapotú kristályokon végeztem. A *D*-vel jelölt kiinduló kristályok a növesztést követő lassú hűtés során kialakult állapotban voltak, bennük a szennyezés precipitált. Az *E*-vel jelölt kiinduló kristályokat úgy nyertem, hogy azokat a növesztés után 5 órán át 600 °C-on tartottam, majd ≈ 100 °C/perc sebességgel szobahőmérsékletre hűtöttem. Ez utóbbi „előkezelt” kristályokban a Sr szennyezés jelentős része szilárd oldaldalban volt.

A vizsgálatok egyik típusánál a méréseket mind a *D*, mind az *E* kristályokon az alábbi módon végeztem el. A kiinduló kristályból kivágtott több kisebb darabot meghatározott *T* hőmérsékleten 5 órán át temperáltam, majd ≈ 100 °C/perc sebességgel szobahőmérsékletre hűtöttem. Ezután mintákat vágtam ki, majd szobahőmérsékleten elvégeztem a töltés mérést, és elektronmikroszkópos felvételeket készítettem. Ezután a méréseket különböző T_a temperálási hőmérsékletekkel (új mintákat használva) megismételtem, s a mért mennyiségeket ábrázoltam a T_a függvényében. Ellenőrzésképpen ugyanezeket a vizsgálatokat elvégeztem szennyezetlen kristályokon is.

A *q* diszlokációtöltés változását a T_a temperálási hőmérséklet függvényében a 3.12. ábra mutatja. A Sr-mal szennyezett kristályokban (az ábrán \circ , illetve \bullet jellel jelölve) a töltés erősen változik a hőkezelés hatására, ami egyértelműen a Sr szennyező jelenlétével függ össze, hiszen a szennyezetlen kristályban ugyanilyen hőkezelésnél nincs számottevő változás. Annak kiderítéséhez, hogy ezek a változások pontosan mivel függnek össze, további vizsgálatokat végeztem.

A kristályban lejátszódó folyamatokról először az elektronmikroszkóppal előállított aranylekorációs képek segítségével tájékozódtam, amelyeket *E*-típusú (előkezelt), illetve tiszta kristályokon a fentiekkel azonos kezelés után kaptam (3.13. ábra). Az eredeti mintában ($T_a = 25$ °C) és a $T_a = 350$ °C-hoz tartozó mintában csak kisméretű precipitátumok láthatók, míg a diszlokációtöltés minimumának megfelelő $T_a = 200$ °C esetben óriásira nőtt tűszerű precipitátumok figyelhetők meg. Ellenőrzésként szolgál az ugyancsak $T_a = 200$ °C-on hőkezelt tiszta kristály, amelyben semmiféle precipitátum nem látható. A képek arra utalnak, hogy a diszlokációtöltés változásai a precipitáció mértékével függnek össze: minél nagyobb az oldott szennyezés mennyisége, annál nagyobb a diszlokációk által szállított töltés. Ez előzetes várakozásainkkal egyezik, de a kation vakanciák szerepének pontosabb megismeréséhez a kristályban a hőkezelés során lezajló folyamatok kvantitatív leírására is szükség van. Ezért az alábbiakban részletesebben foglalkozom az NaCl:Sr rendszer precipitációjával kapcsolatos korábbi kísérleti eredményeink (Sárközi és munkatársai 1977) elemzésével. Itt a precipitációban alapvető szerepet játszó (Hartmanová 1971) kétvegyértékű kation szennyező—kation vakancia-párok (továbbiakban: SzV-párok) számának változását vizsgáltuk a dielektromos veszteség méréssel.



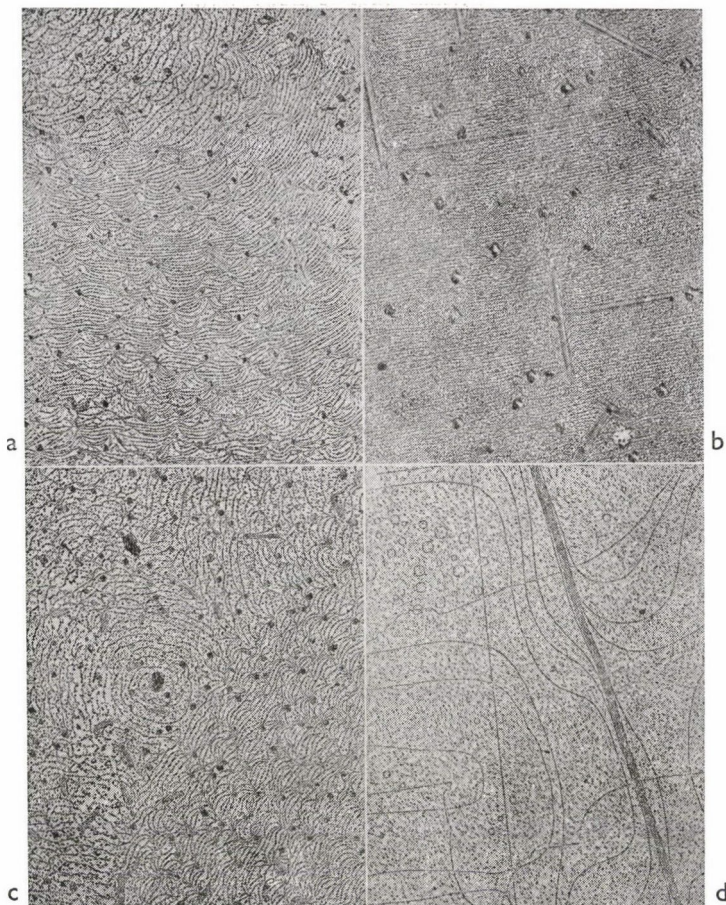
3.12. ábra. A diszlokációtöltés (q) változása a temperálás hőmérsékletének (T_a) függvényében Sr-mal szennyezett NaCl kristályban. \circ — D -típusú (precipitált) kiinduló kristály, \bullet — E -típusú (előkezelt) kiinduló kristály, \times — szennyezetlen kristály

E mérések során kiderült, hogy a SzV-párok eltűnése előkezelt (E -típusú) mintákban elsőrendű kinetikát követ, s a folyamat aktivációs energiája $U_p = 0,65 \pm 0,05$ eV. Az említett cikkben a kinetika magyarázatával nem foglalkoztunk. Itt ismertetek egy egyszerű modellt, amellyel az elsőrendű kinetika értelmezhető.

A SzV-párok a már meglevő kis precipitátumokhoz vándorolnak, amelyek gyakorlatilag végtelen befogadóképességű nyelőkként tekinthetők. Az ellenkező folyamat — legalábbis a kezdeti szakaszban — elhanyagolható. A SzV-párok kiválása megbontja az egyedi szennyező ionok, kation vakanciák és SzV-párok között fennálló egyensúlyt, ezért a kation vakanciák és egyedi szennyező ionok száma is változni fog. A végbemenő átalakulásokat a



reakcióegyenletekkel írhatjuk le, ahol V szabad kation vakanciát, Me^{2+} egyedi két-vegyértékű kation szennyező ion, P SzV-párt, A és A' pedig precipitátumot jelöl. A reakciónyilakhoz írt k_1 , k_2 és k_3 mennyiségek a reakciók sebességi állandói. Ha a megfelelő koncentrációkat c_V , c_M , c_P és c_A -val jelöljük, akkor a SzV-párok koncent-



3.13. ábra. Elektronmikroszkópos felvételek (aranydekoráció) különböző T_a hőmérsékleteken temperált, előkezelt (E -típusú) kristályokon, a) — NaCl:Sr, $T_a=25^\circ\text{C}$, b) — NaCl:Sr, $T_a=200^\circ\text{C}$, c) — NaCl:Sr, $T_a=350^\circ\text{C}$, d) — szennyezetlen NaCl, $T_a=200^\circ\text{C}$ (a nagyítás: 17 500-szoros)

rációjának változási sebességére felírhatjuk (pl. *Moelwyn—Hughes* 1971) a következő egyenletet:

$$\frac{dc_P}{dt} = k_1 c_V c_M - k_2 c_P - k_3 c_P c_A. \quad (3.44)$$

Mivel a (3.42) reakció sebességét a vakanciák diffúziója, (3.43)-ét viszont a SzV-párok jóval lassúbb diffúziója szabja meg, feltehető, hogy a (3.42) reakcióban mindig fennáll a SzV-párok pillanatnyi számának megfelelő egyensúly, azaz

$$k_1 c_V c_M = k_2 c_P. \quad (3.45)$$

Így (3.44)-ből kapjuk

$$\frac{dc_P}{dt} = -k_3 c_A c_P. \quad (3.46)$$

Feltéve, hogy c_A állandó és bevezetve egy új

$$k'_3 = k_3 c_A \quad (3.47)$$

konstanst, az alábbi egyenletre jutunk:

$$\frac{dc_P}{dt} = -k'_3 c_P. \quad (3.48)$$

Vagyis a SzV-párok eltűnésére valóban elsőrendű kinetikát kapunk. Az észlelhető U_P aktivációs energiát a sebességi állandó tartalmazza

$$k'_3 = \text{const} \cdot \exp \left\{ -\frac{U_P}{kT} \right\}. \quad (3.49)$$

A fenti kinetikai egyenletekből természetesen a vakanciákra vonatkozóan is kaphatunk információt. Felhasználva, hogy (Lidiard 1957) gyakorlatilag

$$c_V = c_M \quad (3.50)$$

és hogy (3.45) és (3.50) alapján

$$k_1 c_V^2 = k_2 c_P \quad (3.51)$$

kapjuk

$$\frac{dc_V}{dt} = \frac{k_2}{2k_1 c_V} \frac{dc_P}{dt}, \quad (3.52)$$

amiből (3.48) behelyettesítése és (3.51) alkalmazása után a vakanciák koncentrációjának változására

$$\frac{dc_V}{dt} = -\frac{k'_3}{2} c_V \quad (3.53)$$

adódik. A kation vakanciák száma tehát a SzV-párokéval együtt csökken a precipitáció előrehaladásával, ami — feltéve, hogy a diszlokációtöltés valóban a felszedett kation vakanciáktól származik — megmagyarázza a 3.12. ábrán látható változásokat.

Emellett a (3.53) egyenletből az is következik, hogy a vakanciák eltűnése szintén elsőrendű kinetikát követ, és hogy a folyamat aktivációs energiája (U_V) azonos a SzV-párok eltűnésének aktivációs energiájával

$$U_V = U_P. \quad (3.54)$$

A precipitációs folyamatok és a közben bekövetkező diszlokációtöltés-változás kapcsolatának tisztázása érdekében előkezelt (E) kristályokban elvégeztem a q diszlokációtöltés változásának kinetikai vizsgálatát. Egy nagyobb kristálydarabból több mintát készítettem, s ezeket azonos T_a hőmérsékleten különböző t ideig temperáltam, majd szobahőmérsékletre edzve megmértem a diszlokációtöltést. Mivel a temperálási hőmérsékletek alacsonyok voltak ($T_a \leq 160^\circ\text{C}$), feltehető, hogy a hűtés során a szennyezés állapota nem változott meg, tehát a szobahőmérsékleti mérés a T_a hő-

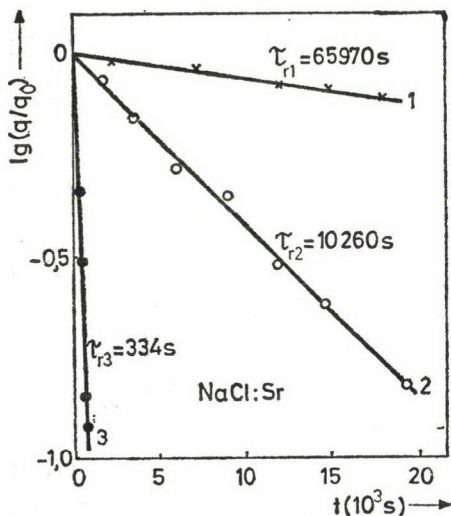
mérsékleten kialakult viszonyokat tükrözi. [Egyébként a SzV-párok eltűnésének vizsgálata (*Sárközi és munkatársai 1977*), amellyel az eredményeimet összehasonlítom, ugyanilyen módon történt.] A mérést különböző T_a hőmérsékletekkel megismételtem, és a diszlokációtöltés időbeli változását $\lg q$ - t grafikonon ábrázoltam. Néhány ilyen kinetikai görbét a 3.14. ábrán mutatok be. Mint látható, a mérési pontok jól közelíthetők a

$$q(t, T_a) = q_0(T_a) \exp \left\{ -\frac{t}{\tau_r(T_a)} \right\} \quad (3.55)$$

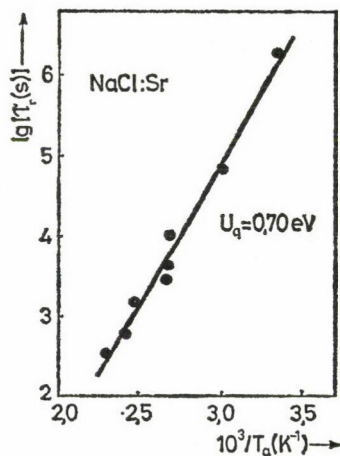
összefüggéssel, vagyis a kinetika valóban elsőrendű. Az aktivációs energiát a relaxációs időt megadó

$$\tau_r(T_a) = \tau_{r0} \exp \left\{ \frac{U_q}{kT_a} \right\} \quad (3.56)$$

függvényből kaphatjuk meg. A 3.15. ábrán láthatók a τ_r relaxációs idők a T_a függvényében $\lg \tau_r - 1/T_a$ grafikonon. A pontokhoz illesztett egyenesből a (3.56) összefüggés alapján $U_q = 0,70 \pm 0,08$ eV aktivációs energia adódik, ami a hibahatáron belül meg egyezik a SzV-párok eltűnésének korábban említett $U_p = 0,65 \pm 0,05$ eV aktivációs energiájával. Ez a (3.54) összefüggés szerint egyúttal azt is jelenti, hogy $U_q \approx U_v$, vagyis a diszlokációtöltés és a kation vakanciák koncentrációja azonos kinetika szerint, közel azonos aktivációs energiával csökken. Ez az eredmény valószínűvé teszi a diszlokációk által szállított töltés és a kation vakanciák koncentrációjának arányosságát.



3.14. ábra. A diszlokációk által szállított töltés (q) időbeli változása a temperálás során Sr-mal szennyezett, előkezelt (E -típusú) NaCl kristályban. A temperálási hőmérsékletek: 1 — $T_a = 59^\circ\text{C}$, 2 — $T_a = 100^\circ\text{C}$, 3 — $T_a = 160^\circ\text{C}$ (q_0 a temperálás előtt mért töltés)



3.15. ábra. A diszlokációk által szállított töltés időbeli változását jellemző τ_r relaxációs idő függése a temperálás hőmérsékletétől (T_a) Sr-mal szennyezett NaCl kristályban

3.143. A diszlokációtöltés és a kation vakanciák koncentrációjának kapcsolata

Az előbb ismertetett vizsgálatok a diszlokációtöltés és a kation vakanciák mennyisége közti összefüggést csak áttételes módon adják meg. Ezért olyan méréseket is végeztem, amelyek lehetővé teszik a töltés és a vakanciakonzentráció közötti kapcsolatot közvetlen tanulmányozását. Ennek érdekében a különböző mintadarabok mindegyikén megmértem a töltést és a kation vakanciák koncentrációjával arányos ionvezetőképességet. A véletlen összefüggés lehetőségének kizárása érdekében a vakanciakonzentrációt több különböző módszerrel változtattam. Ezek a módszerek a következők voltak:

- a szennyezés állapotának változtatása, ami megegyezik a már ismertetett módszerrel, de itt a reprodukálhatóbb eredményeket adó Ca szennyezőt alkalmaztam (10^{-3} mol/mol az olvadékbán),
- különböző mennyiségű ($2 \cdot 10^{-7}$ — 10^{-4} mol/mol) oldott Ca szennyezőt tartalmazó kristályok alkalmazása,
- közelítőleg azonos mennyiségű ($\approx 10^{-5}$ mol/mol), de különböző típusú (Ba, Pb, Sr, Ca, Mg, Mn) kétvegyértékű kation szennyező alkalmazása.

Az utolsóként említett esetben a kation vakanciák számának változása azzal függ össze, hogy a (3.51) egyensúlyi egyenletben a

$$K_e = \frac{k_2}{k_1}, \quad (3.57)$$

ún. egyensúlyi állandó — és így a c_V vakanciakonzentráció is — függ a szennyezés típusától (pl. *Lidiard* 1957). A kation vakanciák c_V koncentrációját a mért vezetőképességből (γ) az ismert

$$\gamma = e\mu c_V \quad (3.58)$$

összefüggéssel számítottam ki, ahol e az elemi töltés, μ pedig a kation vakanciák mozgékonyasága, amely (*Lidiard* 1957)

$$\mu = \frac{4v_0ea_0^2}{kT} \exp \left\{ -\frac{H_m - TS_m}{kT} \right\}. \quad (3.59)$$

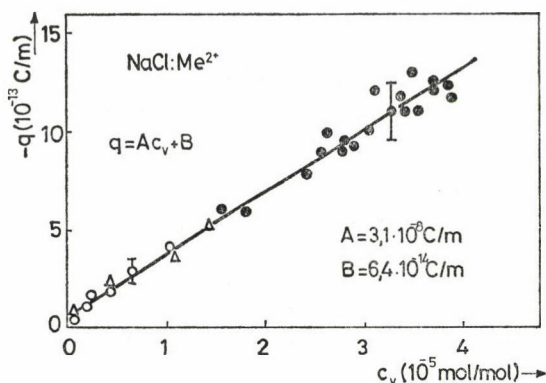
(a_0 a kation—anion távolság a rácsban, k a Boltzmann-állandó, T az abszolút hőmérséklet, v_0 a kation vakancia és a szomszédságában levő kation időegység alatti helycsere kísérleteinek száma, H_m és S_m pedig a kation és a szomszédos vakancia helycserejéhez szükséges aktivációs entalpia és entrópia.)

A q diszlokációtöltésnek a kation vakanciák c_V koncentrációjától való függése szobahőmérsékleten a 3.16. ábrán látható. A kísérleti eredmények jól leírhatók a

$$q = Ac_V + B \quad (3.60)$$

lineáris összefüggéssel, mégpedig függetlenül attól, hogy a kation vakanciák koncentrációját milyen módon változtatjuk.

A közvetlen mérések tehát — összhangban a precipitációs folyamatok elemzéséből kapott közvetett eredménnyel — azt mutatják, hogy a diszlokációk által szállított töltés egyértelmű kapcsolatban van a kation vakanciák koncentrációjával. Eredményeim tehát közvetlen kísérleti alátámasztását adják annak a feltevésnek, hogy a diszlokációk töltése kétvegyértékű kation szennyezőt tartalmazó kristályokban



3.16. ábra. A diszlokációk által szállított töltés (q) függése a kristályban levő szabad kation vakanciák koncentrációjától (c_v) NaCl kristályban. \triangle — különböző mennyiségű ($2 \cdot 10^{-7} - 10^{-3}$ mol/mol) Ca szennyezőt tartalmazó kristályok, \circ — közelítőleg azonos mennyiségű ($\approx 10^{-5}$ mol/mol), különböző típusú kétvegyértékű kation szennyezőt (balról jobbra: Ba, Pb, Sr, Mg, Mn, Ca) tartalmazó kristályok, \bullet — $\approx 10^{-3}$ mol/mol Ca szennyezőt tartalmazó, különbözőképpen hőkezelt kristályok

kation vakanciák felszedéséből származik. Emellett sikerült megállapítani a q és c_v között fennálló kvantitatív összefüggést is. Ennek fizikai magyarázatát a 3.2. pontban adom meg, ahol a töltéstranszport számítására kidolgozott modellt ismertetem.

3.15. A Gyulai—Hartly-effektus mérése

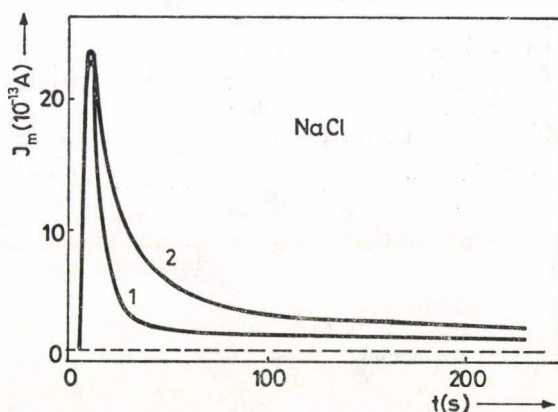
Az 1.4. pontban már ismertettem Whitworthnak azt az elgondolását, hogy a plasztikus deformáció által okozott vezetőképességváltozás (Gyulai—Hartly-effektus) legjelentősebb összetevőjét a töltött diszlokációk mozgása okozza. A vezetőképességnek ez a része (γ_d) Whitworth (1975, 1976) szerint a

$$\gamma_d = \frac{q^2 m^* \dot{\epsilon}}{b^2 \tau^*} \quad (3.61)$$

összefüggéssel adható meg. Itt q a diszlokációtöltés, $\dot{\epsilon}$ a deformációsebesség, b a Burgers-vektor nagysága, τ^* a diszlokációk mozgatásához szükséges mechanikai feszültség egyik összetevője, az ún. effektív feszültség, m^* pedig a diszlokációsebességnek a τ^* effektív feszültségtől való függésére jellemző állandó. A (3.61) összefüggés használatát — és egyben ellenőrzését is — az nehezíti meg, hogy m^* értéke az irodalomban széles határok között változik, másrészt mind q , mind pedig τ^* értéke függ a kísérleti körülményektől (pl. a külső mechanikai feszültségtől, a deformációsebességtől, a hőmérséklettől). Feltehetőleg ez az oka annak is, hogy Camagni és Manara (1965) méréseiben — amelyek a Whitworth-elmélet alapjául szolgáltak — nem teljesül a $\gamma_d \sim \dot{\epsilon}$ arányosság. Céлом ennek az arányosságnak az ellenőrzése volt egy olyan mérési eljárás segítségével, amelynél a mérés során q és τ^* értéke közel állandónak tekinthető.

3.151. A mérési módszer

Az effektust ugrásszerűen alkalmazott terheléssel, a klasszikus módszer (1.4. pont) szerint mértem, de a kapott eredményeket a szokásostól alapvetően eltérő módon használtam fel. A mérés során ugyanis nem a hirtelen terhelés által okozott áramugrást vizsgáltam, hanem a terhelést a mintán hagyva, a létrejövő kúszás által okozott effektust mértem. Erre az ad lehetőséget, hogy a terhelés végéig a mintán marad, mint akkor, ha az áram-maximum elérésének pillanatában a terhet levesszük. Ezt a jelenséget mutatja a 3.17. ábra. A két esetben a terhelés azonos (120 N) volt, s a maximális áram is közel azonos. A 2 görbe a terheléssel, az 1 pedig a terhelés levételével kapott áram (I_m) időbeli változását mutatja. A két áram különbsége a kúszás következtében fellépő Gyulai—Hartly-effektussal hozható kapcsolatba.



3.17. ábra. A Gyulai—Hartly-effektus jellegzetes áram-idő görbéi. 1 — az effektust létrehozó terhelés csak az áram-maximum eléréséig működött, 2 — a terhelés végéig a kristályon volt. A mérés szennyeztelen NaCl kristályon történt, a terhelés $F=120$ N, a mérési hőmérséklet $T=50$ °C volt

A mérés kvantitatív kiértékeléséhez meg kell oldani a 3.18. ábrán látható, változó $R=R(t)$ kristályellenállást tartalmazó mérőáramkör differenciálegyenletét a lecsengési periódusban. A megoldandó egyenlet az ábra jelöléseivel

$$\frac{dI_m(t)}{dt} + \frac{1}{C_m} \left(\frac{1}{R(t)} + \frac{1}{R_m} \right) I_m(t) = \frac{U_T}{C_m R_m R(t)}. \quad (3.62)$$

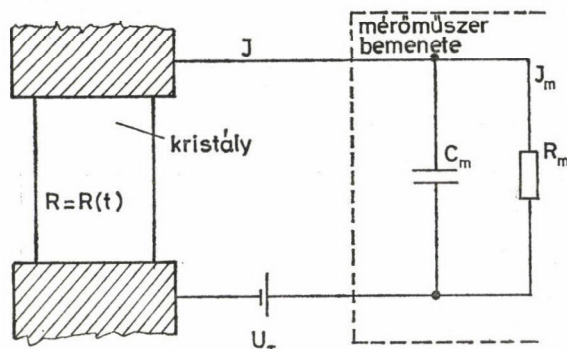
Itt C_m a műszer bemenetén megjelenő teljes kapacitást, R_m pedig a műszer bemenő ellenállását jelenti. Figyelembe véve, hogy a méréseim során mindig $R \gg R_m$, és R -t a γ vezetőképességgel kifejezve az alábbi egyenletet kapjuk

$$\frac{dI_m(t)}{dt} + \frac{1}{R_m C_m} I_m(t) = \frac{U_T A}{C_m R_m h} \gamma(t). \quad (3.63)$$

(A a kristály felülete, h a magassága.) Megjegyzem, hogy az $R \gg R_m$ feltétel miatt a mintán átfolyó I áramra érvényes az egyszerű

$$I(t) = \frac{U_T A}{h} \gamma(t) \quad (3.64)$$

összefüggés, mivel azonban ezt az áramot mérni nem tudjuk, meg kell oldanunk a fenti differenciálegyenletet.



3.18. ábra. A Gyulai—Hartly-effektus mérésére szolgáló mérőáramkör vázlata

Ha a $t=0$ időpillanat az áram-maximum elérésének időpontja, és ekkor az áram értéke $I_m(0)=I_0$, akkor a megoldás

$$I_m(t) = \left[K' \int_0^t \gamma(t') \exp\left\{\frac{t'}{\tau}\right\} dt' + I_0 \right] \exp\left\{-\frac{t}{\tau}\right\}. \quad (3.65)$$

Itt bevezettük a

$$\tau = C_m R_m \quad (3.66)$$

és a

$$K' = \frac{U_T A}{C_m R_m h} \quad (3.67)$$

jelöléseket.

Ha feltesszük, hogy a vezetőképesség összetevői additívak, akkor a terheléssel és terhelés nélkül kapott lecsengési áramok ΔI_m különbsége

$$\Delta I_m(t) = \left[K' \int_0^t \gamma_d(t') \exp\left\{\frac{t'}{\tau}\right\} dt' + \Delta I_0 \right] \exp\left\{-\frac{t}{\tau}\right\}. \quad (3.68)$$

(ΔI_0 az áramok különbsége a $t=0$ pillanatban.) Ez az összefüggés adja meg a kapcsolatot a mért áramtöbblet és a deformáció által okozott γ_d vezetőképesség-változás között. Ha ezután (3.68)-ba beírjuk γ_d (3.61) kifejezését, akkor a Whitworth-elméleten alapuló elméleti $\Delta I_m(t)$ függvényt kaphatunk. Ha ezt összevetjük a mért görbével, akkor a (3.61) összefüggést ellenőrizhetjük. Ehhez azonban szükségünk van az

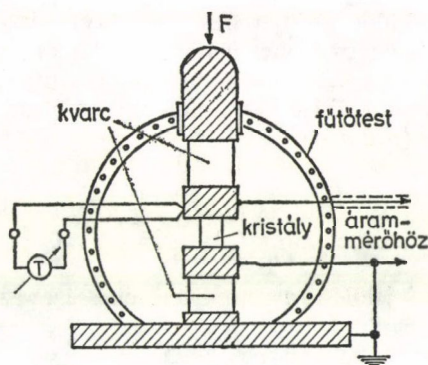
$\dot{\varepsilon}(t)$ függvényre, amit az áramméréssel egyidejűleg felvett $\varepsilon(t)$ deformáció-görbéből határozunk meg. Ha még feltételezzük (Rakova és Predvogyityelev 1968, Gilman 1969); hogy az állandó külső terhelés mellett végbemenő folyamatban a diszlokáció-sebesség (és így a q diszlokáció-töltés), valamint a τ^* effektív feszültség nem változik, akkor (3.61) felhasználásával (3.68)-ból kapjuk

$$\Delta I_m(t) = \left[\frac{K' q^2 m^*}{b^2 \tau^*} \int_0^t \dot{\varepsilon}(t') \exp \left\{ \frac{t'}{\tau} \right\} dt' + \Delta I_0 \right] \exp \left\{ -\frac{t}{\tau} \right\}, \quad (3.69)$$

ahol $\dot{\varepsilon}(t)$ kísérletileg meghatározandó függvény.

3.152. Kísérleti eszközök

Az effektus mérése elvben igen egyszerű: a kristályt össze kell nyomni, s egyidejűleg mérni kell az elektromos tér hatására rajta átfolyó áramot. A mérés gyakorlati kivitelezésénél azonban komoly problémát jelent a kristály igen kis vezetőképessége és a deformációnál egyidejűleg fellépő Sztjepanov-effektus. Előbbi probléma — a 3.124. pontban már leírt módon — megfelelő mérőcella és érzékeny árammérő műszer alkalmazásával, utóbbi pedig a mintageometria megfelelő megválasztásával és előzetes deformációval küszöbölhető ki (1.4. pont).



3.19. ábra. A Gyulai—Hartly-effektus mérésére szolgáló mérőcella vázlata

A mérőcella egy dupla falú földelt fémház, amelynek falai között a mérési hőmérséklet változtatására szolgáló, ellenálláshuzalból készült fűtőspirálok vannak. A fémház alján található a mintát tartó egyik elektróda, a tetején pedig egy könnyen mozgó rúd nyúlik be, amely részben a minta deformálására szolgál, részben pedig a másik elektróda szerepét játssza (3.19. ábra). Az elektródák szigetelését kvarc betétek biztosítják. Az áram mérésére VAJ 51.1S típusú rezgőkondenzátoros elektrométert használtam, amelyhez vonalíró csatlakozott. A hőmérséklet mérése Ni-CrNi termoelemmel, szabályozása CHINOIN LP 839 típusú automatikus hőmérsékletszabályozóval történt.

A minta deformálása a hagyományos módszerrel (Gyulai és Hartly 1928, Kiss 1966) történt a nyomófejhez csatlakozó egykarú emelő segítségével, amelynek szabad végén súlyok felrakására szolgáló serpenyő függött. Az erő- és teherkar aránya 6:1 volt. A továbbiakban terhelésként megadott F erő mindig a mintára ható erőt jelenti.

A deformációt az erőkar végéhez illesztett 0,01 mm osztású mérőórával mértem.

A Sztjepanov-effektus kiküszöbölése érdekében nem használtam magas mintákat. A mintaméret általában $4 \times 4 \times 6$ mm³ volt. Ugyancsak a Sztjepanov-effektus elkerülése végett a mintákat előzetesen addig deformáltam, amíg a mintára kapcsolt feszültség előjelének változtatása az árammaximumok nagyságát nem befolyásolta. Ez kb. 10%-os deformáció után következett be.

A minta terhelését 60, illetve 120 N-os lépésekben növeltem. A terheléssel és terhelés nélkül végrehajtott lecsengési mérések összehasonlítására csak egymást közvetlenül követő terheléseknél kapott, közel azonos csúcsmagasságú görbéket használtam.

A méréseket a lehető legnagyobb folyási deformáció elérése érdekében szennyezetlen NaCl kristályokon végeztem.

A mérés hőmérséklete 50 °C volt, ami lehetővé tette a mintán átfolyó áram megbízható mérését.

3.16. A Gyulai—Hartly-effektus eredetének kísérleti vizsgálata

A kúszási görbék a különböző terheléseknél azonos jellegűek voltak, bár a kúszási deformáció nagysága természetesen függ az alkalmazott terheléstől. A 3.20a. ábrán egy $F_1 = 120$ N és egy $F_2 = 60$ N terhelésnél megfigyelt kúszási görbe látható. A görbék $\lg \varepsilon - \lg t$ koordinátákban ábrázolva egyenest adnak (3.20b. ábra), vagyis a deformáció időfüggése leírható az

$$\varepsilon = \alpha' t^n \quad (3.70)$$

összefüggéssel, ahol α' a terheléstől jelentősen függő szám, n pedig a terheléssel alig változik (a 3.20b. ábra görbéire $n_1 = 0,11$, $\alpha'_1 = 4,3 \cdot 10^{-2} \text{ s}^{-0,11}$, illetve $n_2 = 0,09$, $\alpha'_2 = 2,2 \cdot 10^{-2} \text{ s}^{-0,09}$).

Bevezetve az $\alpha = n\alpha'$ jelölést, a deformációsebességre az

$$\dot{\varepsilon}(t) = \frac{\alpha}{t^{1-n}} \quad (3.71)$$

kifejezést kapjuk. Mivel a lecsengés vizsgálatánál $t=0$ az áram maximális értékének megfelelő időpontot jelenti, a továbbiakban a (3.71) összefüggést az

$$\dot{\varepsilon}(t) = \frac{\alpha}{(t+t_0)^{1-n}} \quad (3.72)$$

alakban használom, ahol t_0 ($\approx 4-5$ s) a deformáció kezdetétől a $t=0$ pillanatig eltelt idő.

A (3.72) összefüggés felhasználásával a ΔI_m áramkülönbségre kapott (3.69) egyenlet így alakul:

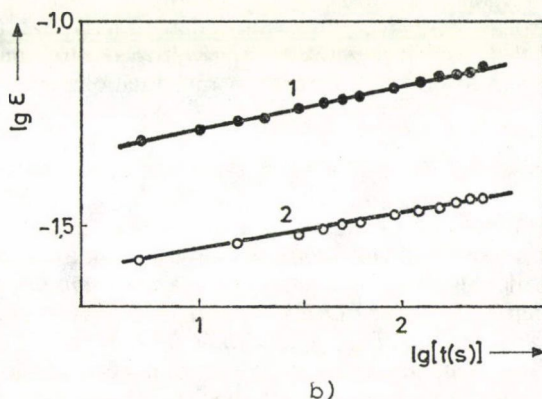
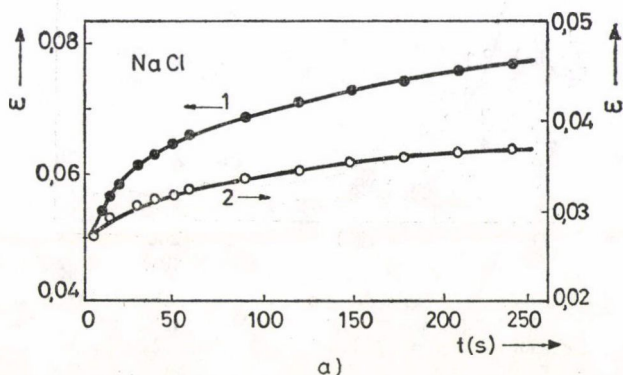
$$\Delta I_m(t) = \left[K \int_0^t \exp \left\{ \frac{t'}{\tau} \right\} (t' + t_0)^{n-1} dt' + \Delta I_0 \right] \exp \left\{ -\frac{t}{\tau} \right\}, \quad (3.73)$$

ahol bevezettük a

$$K = \frac{K' q^2 m^* \alpha}{b^2 \tau^*} \quad (3.74)$$

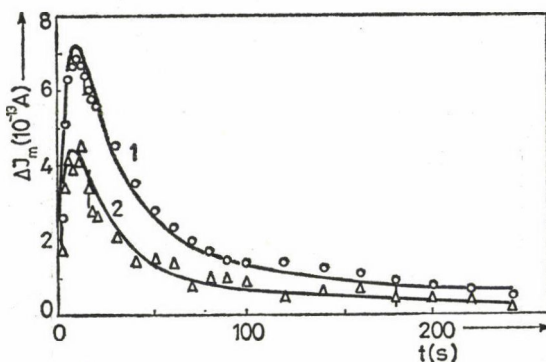
jelölést.

A terheléssel és terhelés nélkül kapott lecsengési áramok ΔI_m különbségének időfüggése két különböző terhelés esetén a 3.21. ábrán látható. Az alkalmazott terhelések $F_1=120$ N, illetve $F_2=60$ N. A körök és háromszögek mérésből kapott értékek, a folytonos vonallal kihúzott görbék pedig a (3.73) összefüggésből numerikus integrálással kapott elméleti eredményeket mutatják. A K konstans értékét illesztéssel határoztam meg. Mint látható, az elméleti görbék a hibahatáron belül illeszthetők a kísérleti pontokhoz. Kérdés, hogy a K konstans illesztett értékei ($K_1=1,11 \cdot 10^{-12}$ SI egység, illetve $K_2=0,61 \cdot 10^{-12}$ SI egység) reálisak-e. Ennek



3.20. ábra. Szennyezetlen NaCl kristály kúszási görbéi $T=50$ °C hőmérsékleten $F_1=120$ N (1) és $F_2=60$ N (2) terhelésnél
(a) — $\varepsilon-t$ koordináták, b) — $\lg \varepsilon - \lg t$ koordináták)

eldöntésére a (3.67) és (3.74) összefüggések segítségével megbecsültem a diszlokációk által szállított q töltést. A mérés adataiból $K' = 0,23 \text{ Vm/s}$, egyéb méréseimből (4.1. pont) $\tau^* \approx 0,01 \text{ MPa}$, $m^* = 9$, a Burgers-vektor nagysága $b = 4 \cdot 10^{-10} \text{ m}$. Ezekből az adatokból a fenti α és K értékekkel számolva a diszlokációtöltésre $q_1 = 4,3 \cdot 10^{-13} \text{ C/m}$, illetve $q_2 = 4,8 \cdot 10^{-13} \text{ C/m}$ adódik. A pontbenyomat módszerrel szoba-hőmérsékleten ugyanilyen kristályokra a diszlokációtöltés $q = 7 \cdot 10^{-14} \text{ C/m}$ (3.143. pont). Az itt kapott, 6–7-szer nagyobb értékek reálisnak mondhatók, ha figyelembe vesszük, hogy a mérés 25°C -kal magasabb hőmérsékleten történt, mint a pontbenyomat módszerrel. A 3.23. pontban ismertetendő számítás szerint ez a hőmérséklet-különbség okozhat ilyen eltérést. Eszerint a kapott K értékek elfogadhatók.



3.21. ábra. A kúszás által okozott áramtöbblet (ΔI_m) időbeli változása szennyezetlen NaCl kristályban $T = 50^\circ\text{C}$ -on, $F_1 = 120 \text{ N}$ (1) és $F_2 = 60 \text{ N}$ (2) terhelés esetén. A körök és háromszögek mérési eredmények, a folytonos görbék számítás eredményei

Mindezek alapján megállapítható, hogy a Whitworth-elmélet alkalmas a kúszás által okozott áramváltozás magyarázatára, ami alátámasztja azt az elképzelést, hogy a deformáció közben észlelt vezetőképesség-változás túlnyomó része töltött diszlokációknak külső elektromos térben történő mozgásából ered.

3.2. Mozgó diszlokációk által okozott töltéstranszport számítása

Mint korábban (1.3. pont) említettem, az irodalomban a mozgó diszlokációk által létrehozott töltéstranszport elméleti leírása hiányzik. Annak a modellnek a kidolgozását, amelyet az alábbiakban ismertetek, az *Alsic és munkatársai* (1975) által végrehajtott mérések tették lehetővé. Legfontosabb eredményük az volt, hogy a diszlokációtöltés jellegzetes módon függ a diszlokáció sebességétől (kritikus sebesség létezése és annak exponenciális függése az abszolút hőmérséklet reciprokától; bővebben: 1.2. pont), ami termikusan aktivált mechanizmusra utal.

Elvileg elképzelhető, hogy a vakanciák diffúziós mozgással követik a diszlokációt, hiszen az éldiszlokáció vonzza a kation vakanciákat (1.5. pont). A vonzás miatt a diszlokáció környezetében irányított vakanciadiffúzió indul meg és a diszlokáció

körül egy vakanciafelhő alakul ki. Ha a diszlokáció mozog, akkor ez a felhő a sebességtől és a hőmérséklettől függő mértékben vele együtt halad, vagyis egy kényszerített diffúzió alapuló töltéstranszport jöhet létre. A kérdés csak az, hogy ez a töltéstranszport elegendően nagy-e a tapasztalt diszlokációtöltés-értékek magyarázatához.

3.21. A diffúziós modell

A modell kidolgozásánál abból a feltevésből indultam ki, hogy a kation vakanciák diffúziós mechanizmussal mozognak a diszlokáció rugalmas és elektromos térének hatására. A vakanciatranszport ekkor elvileg a mozgó potenciáltérrel felírt diffúziós egyenletből számítható.

A problémát rugalmas tér esetére *Cottrell és Jaswon* (1949) tárgyalta először, szennyező atomoknak a diszlokációra kifejtett fékező hatását vizsgálva. A folyamatot kétdimenziósnek tekintve a diszlokációval együttmozgó koordinátarendszerben a diffúziót leíró egyenlet

$$\frac{\partial c(x, y)}{\partial t} = -\vec{v} \left(-D \vec{\nabla} c - \frac{D}{kT} c \vec{\nabla} U - c \vec{v} \right), \quad (3.76)$$

ahol c a diffundáló ponthibák atomi koncentrációja, t az idő, D a diffúziós állandó külső potenciáltér nélkül, T az abszolút hőmérséklet, U a ponthiba potenciális energiája, \vec{v} a diszlokáció sebessége, k a Boltzmann-állandó, $\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j}$.

Cottrell és Jaswon az egyenletet közelítő módszerrel oldotta meg, de csak a szennyezők diffúziós mozgásánál kisebb sebességű diszlokáció esetére, és elektrosztatikus kölcsönhatás nélkül (esetükben ilyen nem volt), így ez a megoldási módszer számunkra nem megfelelő. Ugyanennek a problémának egy tetszőleges sebességre alkalmazható numerikus megoldását adta *Yoshinaga és Morozumi* (1971), akiknek módszere bizonyos módosításokkal (pl. elektrosztatikus kölcsönhatás figyelembevétele, szennyező atomok helyett kation vakanciák mozgása) esetünkben is alkalmazható. A diffúziós probléma megoldására ezt a módszert használtam, és az alábbiakban ennek a konkrét esetre adaptált változatát ismertetem.

3.211. A számítási módszer általános leírása

A módszer alap gondolata az, hogy a ponthibák (esetünkben kation vakanciák) atomi ugrásokkal mozognak a kristályban, és az ugrási valószínűséget, illetve az ugrási frekvenciát a diszlokáció tere befolyásolja. A kristály egy adott pontjában a vakanciakoncentráció változását az oda beugró és onnan távozó vakanciák száma szabja meg.

A számításához a diszlokáció körül egy hozzá rögzített hálót veszünk fel (3.22a. ábra), és e háló pontjaiban számítjuk a koncentrációt. A háló pontjainak s távolsága a kation vakanciák ugrási távolságával egyezik meg. Az (i, j) pontból az (m, n) pontba történő ugrások gyakoriságát a v_{ij}^{mn} ugrási frekvenciával (*Glyde* 1967) jellemezzük, amely az időegység alatt átlagosan bekövetkező ugrások számát jelenti.

A diszlokációtól távol az ugrási frekvencia

$$\nu = \nu_0 \exp \left\{ \frac{S}{k} \right\} \exp \left\{ -\frac{H}{kT} \right\}, \quad (3.77)$$

ahol ν_0 az atomok rezgési frekvenciájával kapcsolatos állandó, S és H az ugrás aktivációs entrópiája és entalpiája, k a Boltzmann-állandó, T az abszolút hőmérséklet. Ezt az iránytól független ν ugrási frekvenciát a vakanciának a diszlokációval való kölcsönhatása módosítja és irányfüggővé teszi (Manning 1968)

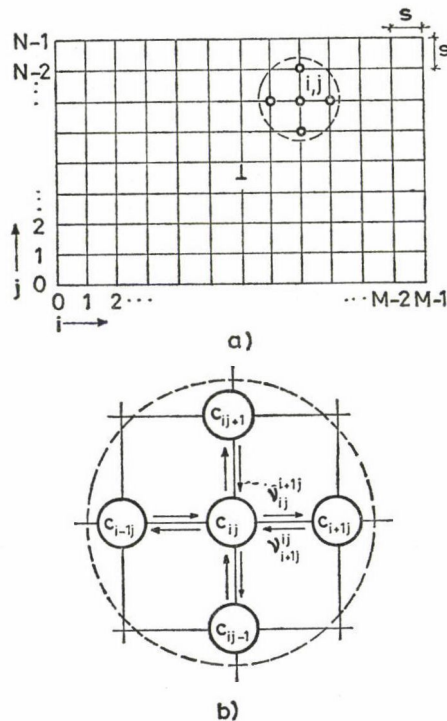
$$\nu_{ij}^{mn} = \nu \exp \left\{ -\frac{\Delta U_{ij}^{mn}}{2kT} \right\}, \quad (3.78)$$

ahol

$$\Delta U_{ij}^{mn} = U_{mn} - U_{ij} \quad (3.79)$$

az energiaváltozás a diszlokáció terében végbemenő ugrásnál. Itt feltételezzük, hogy az aktivációs entrópia változatlan, és az entalpia változása az energiaváltozással helyettesíthető.

A ν_{ij}^{mn} ugrási frekvenciák ismeretében a 3.22b. ábrán látható ugrások figyelembe



3.22. ábra. A vakanciatranszport számításához felvett háló (a), illetve a koncentrációk jelölései és a figyelembe vett vakanciaugrások (b)

vételével nyugvó diszlokáció esetén a koncentrációváltozás sebessége az (i, j) pontban közelítőleg

$$\begin{aligned} \frac{\Delta c_{ij}}{\Delta t} \Big|_{v=0} = & v_{i+1j}^{ij} c_{i+1j} (1 - c_{ij}) - v_{ij}^{i+1j} c_{ij} (1 - c_{i+1j}) + \\ & v_{i-1j}^{ij} c_{i-1j} (1 - c_{ij}) - v_{ij}^{i-1j} c_{ij} (1 - c_{i-1j}) + \\ & v_{ij+1}^{ij} c_{ij+1} (1 - c_{ij}) - v_{ij}^{ij+1} c_{ij} (1 - c_{ij+1}) + \\ & v_{ij-1}^{ij} c_{ij-1} (1 - c_{ij}) - v_{ij}^{ij-1} c_{ij} (1 - c_{ij-1}). \end{aligned} \quad (3.80)$$

Az egyenlet felírásánál tekintetbe vettük azt is, hogy ugrás csak olyan helyről történhet, ahol van vakancia, és csak olyan helyre, ahol még nincs vakancia (a c_{ij} atomi koncentráció egyenlő a vakancia találati valószínűségével).

Ha a diszlokáció mozog, akkor figyelembe kell venni még azt is, hogy a háló pontjai mozognak a kristályhoz képest. Ha a 3.22. ábrán levő diszlokáció balról jobbra v sebességgel mozog, akkor emiatt s távolság befutása után a vele együtt mozgó háló (i, j) pontjában a c_{ij} koncentráció helyébe c_{i+1j} lép. Ezt is figyelembe véve, a koncentrációváltozás sebessége az (i, j) pontban

$$\frac{\Delta c_{ij}}{\Delta t} = \frac{\Delta c_{ij}}{\Delta t} \Big|_{v=0} + v \frac{c_{i+1j} - c_{ij}}{s}. \quad (3.81)$$

Ha (3.81) jobb oldalát $\varphi_{ij}(t)$ -vel jelöljük, akkor a koncentrációváltozások számításához szükséges egyenletek

$$\begin{aligned} \Delta c_{ij}(t) &= \varphi_{ij}(t) \Delta t \\ c_{ij}(t + \Delta t) &= c_{ij}(t) + \Delta c_{ij}(t) \\ i &= 0, 1, 2, \dots, M-1 \\ j &= 0, 1, 2, \dots, N-1. \end{aligned} \quad (3.82)$$

Vagyis a kezdeti koncentrációeloszlást ismerve, az eloszlás időbeli változása Δt lépésekben kiszámítható. Kimutatható, hogy ez az eljárás matematikailag a (3.76) parciális differenciálegyenletnek véges különbségek módszerével történő megoldását jelenti.

Ha csak a kvázistacionárius állapot ismerete fontos, akkor a

$$\begin{aligned} \varphi_{ij}(t) &= 0 \\ i &= 0, 1, 2, \dots, M-1 \\ j &= 0, 1, 2, \dots, N-1 \end{aligned} \quad (3.83)$$

nemlineáris egyenletrendszerrel kell megoldani.

A megoldáshoz szükséges peremfeltételek mindkét esetben

$$c_{ij} = c_v \quad \text{ha} \quad \begin{cases} i = 0 & \text{vagy} & i = M-1 & \text{vagy} \\ j = 0 & \text{vagy} & j = N-1, \end{cases} \quad (3.84)$$

ahol c_v a vakanciák atomi koncentrációja a kristálynak a diszlokációtól távoli tartományában.

c_v értékét vagy a vezetőképességből számíthatjuk ki a (3.58)–(3.59) összefüggések alapján, vagy — ha a vezetőképesség nem ismeretes, akkor — a részletesebben felírt (3.51) egyenlet (pl. *Barr és Lidiard* 1970)

$$\frac{c_v^2}{c - c_v} = 12 \exp \left\{ \frac{H_a - T S_a}{kT} \right\} \quad (3.85)$$

felhasználásával kaphatjuk meg (H_a és S_a) a szennyező ion—vakancia-pár kötési entalpiája, illetve entrópiája, c a szennyezéskonzentráció.

A c_{ij} vakanciakoncentrációk ismeretében az egységnyi hosszúságú diszlokációval együttmozgó többlettöltést a

$$q = \frac{e}{2a_0} \sum_{i,j} (c_{i,j} - c_v) \quad (3.86)$$

összefüggésből kapjuk meg. Az összegezés a háló pontjaira történik; e az elemi töltés, a_0 a kation—anion-távolság.

3.212. Töltéstranszport nagy diszlokációsebességnél

A diffúziós modell természetéből következik, hogy a diszlokációsebesség növelésével az ilyen módon szállított vakanciák száma csökken, és elég nagy sebesség esetén mérésel kimutathatatlaná válik. *Alsic és munkatársai* (1975) mérései azonban arra utalnak, hogy a diszlokációk által szállított töltés egy bizonyos sebesség felett nem csökken tovább. Ekkor nyilván más töltésszállítási mechanizmus lép előtérbe. E jelenség egy lehetséges magyarázata az, hogy az ilyenkor mérhető töltés az egyedülálló fél-lépcsők jelenlétével kapcsolatos, amelyeket a gyorsan mozgó diszlokáció nem tud elveszíteni, hiszen ezek csak sok atom diffúziós mozgásával tűnhetnek el. Ezek a lépcsők mozgásuk során vakanciákat vehetnek fel, és így a diszlokációk a kristályban túlsúlyban lévő vakanciák — esetünkben a kation vakanciák — töltésével azonos töltésűek lesznek.

Elvileg erre a fajta feltöltődésre vonatkozó kinetikai egyenlet is felírható, de mivel az egyenletben szereplő mennyiségek többsége (pl. a vakancia felvételének vagy leadásának valószínűsége, a lépcsők száma) ismeretlen, az egyenlet gyakorlatilag használhatatlan. Számításaimban ezért ezt a sebességtől és hőmérséklettől függetlennek tekintett töltést kísérleti adatként kezelem és additív járulékként veszem figyelembe. Ezt a járulékot q_∞ -nel jelölve, a diszlokációtöltés számítására (3.86) helyett a

$$q = \frac{e}{2a_0} \sum_{ij} (c_{ij} - c_v) + q_\infty \quad (3.87)$$

összefüggést használom.

3.213. A diszlokációk és kation vakanciák kölcsönhatása

A kation vakanciáknak a diszlokáció rugalmas és elektromos terében történő diffúziója csak a v_{ij}^{mn} ugrási frekvenciák ismeretében számítható. Ehhez ismerni kell a (3.79) egyenletben szereplő U_{ij} energia értékeit. Esetünkben ez az energia a diszlokáció és kation vakancia kölcsönhatásából származik és az U_{ij}^E rugalmas összetevő

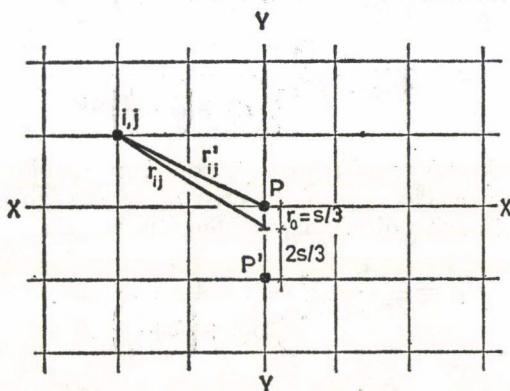
mellett a diszlokáció és a vakancia töltése miatt egy U_{ij}^c elektrosztatikus járulékot is tartalmaz

$$U_{ij} = U_{ij}^E + U_{ij}^c. \quad (3.88)$$

A kölcsönhatási energia rugalmas részét a leegyszerűsített

$$U_{ij}^E = -U_0 \frac{r_0}{r_{ij}} \quad (3.89)$$

összefüggéssel számítom, ahol r_{ij} a diszlokáció és az (i, j) pont távolsága, r_0 a diszlokáció és a hozzá legközelebb eső hálópont távolsága, U_0 a kölcsönhatási energia az r_0 távolságban levő vakancia esetén (a jelöléseket a 3.23. ábrán is feltüntettem).



3.23. ábra. A potenciális energia számításánál használt távolságjelölések

A (3.89) kifejezés a kontinuum elmélet méreteffektust megadó (1.18) összefüggéséből származtatható, ha elhagyjuk a szögfüggést, aminek a helyessége a diszlokáció közelében egyébként is kétséges (1.5. pont). A szögfüggés helyett azt az atomisztikus számításokból származó eredményt (Bassani és Thomson 1956) vettem figyelembe, hogy a kation vakancia kötési energiája az éldiszlokáció komprimált zónájában kétszer akkora, mint a dilatált zónában. Ennek a feltételnek úgy tettem eleget, hogy a diszlokáció csúszási síkját a két rácssík felezősíkjához képest a 3.23. ábrán látható módon eltoltam. Így a komprimált zóna diszlokációhoz legközelebbi pontjában (P) a kölcsönhatási energia kétszer akkora, mint a dilatált zóna legközelebbi pontjában (P'). A (3.89) egyenletben szereplő U_0 energia értékét kísérleti eredményekhez történő illesztés útján határoztam meg.

A vakancia és a töltött diszlokáció elektrosztatikus kölcsönhatása miatt a vakanciaelosztás (illetve az U_{ij}^c energia) meghatározásához a (3.76) diffúziós egyenlettel szimultán meg kell oldani a kétdimenziós

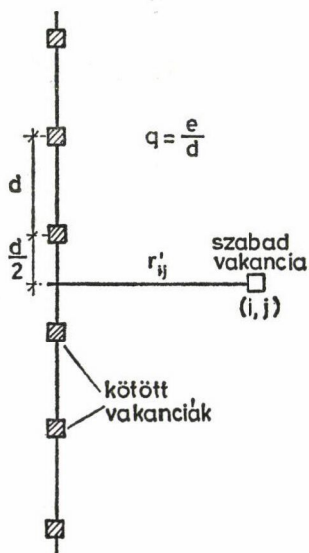
$$\nabla^2 \varphi = -\frac{\rho}{\epsilon_0 \epsilon_r} \quad (3.90)$$

Poisson-egyenletet is (φ az elektrosztatikus potenciál; ρ a töltéssűrűség, ε_0 és ε_r a vákuum permittivitása és az anyag relatív permittivitása). Ez az egyébként is jelentős mennyiségű számítási munkát jelentősen megnöveli. Az elektrosztatikus potenciál számításánál azonban mód van bizonyos egyszerűsítésekre. Mivel a diszlokáció-vakancia kölcsönhatás vonzó része a távolsággal elég gyorsan csökken, feltehető, hogy a diszlokáció által mozgatott vakanciák döntő többsége a diszlokáció közvetlen közelében helyezkedik el (ezt a számítások eredményei valóban igazolják; l. 3.221. pont). Emiatt a diszlokáció elektromos szempontból egy vonal mentén elhelyezkedő töltéssornak tekinthető. A probléma egyszerűsítése érdekében — *Whitworth* (1968) eljárását követve — még azt is feltételeztem, hogy ezek a töltések egymástól azonos d távolságban helyezkednek el és a vakancia mindig a diszlokáción lévő vakanciák közti távolság felezőpontjával találkozik (ez az egyszerűsítés az elektrosztatikus kölcsönhatást kissé túlbecsüli). Ekkor a 3.24. ábra jelöléseivel a háló (i, j) pontjában a potenciál

$$\varphi_{ij} = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r} 2 \sum_{k=0}^{N_d} \frac{1}{\sqrt{r'_{ij}{}^2 + \left(k + \frac{1}{2}\right)^2 d^2}}, \quad (3.91)$$

ahol r'_{ij} a töltést tartalmazó vonal és az (i, j) pont közti távolság (3.23. ábra), e az elemi töltés, N_d a diszlokáció egyik felén levő összes vakanciák száma. Ezzel az elektrosztatikus kölcsönhatásból származó potenciális energia

$$U_{ij}^C = \frac{e^2}{2\pi\varepsilon_0\varepsilon_r} \sum_{k=0}^{N_d} \frac{1}{\sqrt{r'_{ij}{}^2 + \left(k + \frac{1}{2}\right)^2 d^2}}. \quad (3.92)$$



3.24. ábra. Az elektrosztatikus kölcsönhatás számításának modellje

Az U_{ij}^C potenciális energia természetesen függ a diszlokáció egységnyi hossza és q töltésétől, hiszen

$$q = \frac{e}{d} \quad (3.93)$$

miatt

$$U_{ij}^C = \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0\epsilon_r} \sum_{k=0}^{N_d} \frac{1}{\sqrt{r_{ij}^{\prime 2} + \left(k + \frac{1}{2}\right)^2 \frac{e^2}{q^2}}}. \quad (3.94)$$

Bevezetve az

$$R_{ij}^k(q) = \sqrt{r_{ij}^{\prime 2} + \left(k + \frac{1}{2}\right)^2 \frac{e^2}{q^2}} \quad (3.95)$$

jelölést, (3.94) rövidebben így írható

$$U_{ij}^C = \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0\epsilon_r} \sum_{k=0}^{N_d} \frac{1}{R_{ij}^k(q)}. \quad (3.96)$$

A (3.79), (3.88), (3.89) és (3.96) összefüggések alapján az (i, j) pontból az (m, n) pontba történő vakanciaugrásnál a teljes energiaváltozás

$$\Delta U_{ij}^{mn} = -U_0 r_0 \left(\frac{1}{r_{mn}} - \frac{1}{r_{ij}} \right) + \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0\epsilon_r} \sum_{k=0}^{N_d^*} \left(\frac{1}{R_{mn}^k(q)} - \frac{1}{R_{ij}^k(q)} \right). \quad (3.97)$$

A (3.97) összefüggésben szereplő összeggel ΔU^C értéke a valóságos N_d értéknél jóval kisebb N_d^* értékkel is kielégítő pontossággal megkapható (5%-os pontosság még a legkedvezőtlenebb esetben is elérhető $N_d^* \approx 100$ értékkel).

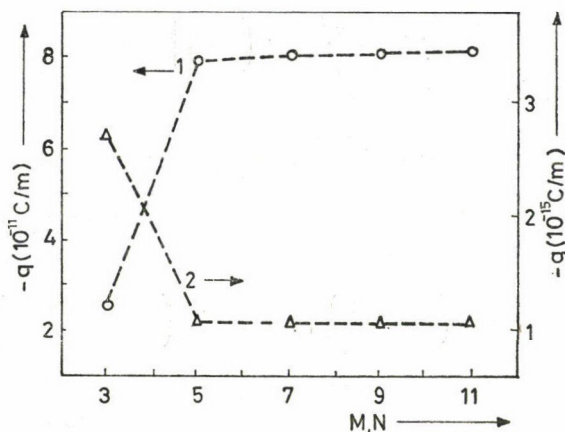
3.22. A diffúziós modell alkalmazásai

Az ismertetett modellel számításokat végeztem egyrészt a számítási paraméterek kiválasztása érdekében, másrészt a modell kísérleti ellenőrzése céljából. Ez utóbbi cél eléréséhez olyan kísérleti vizsgálatokat választottam ki, amelyeknek eredményei a modellel összevethetők, és a modellben használt paraméterek értéke a kísérlet adataiból vagy ésszerű becslés alapján megállapítható. A számításokat számítógéppel végeztem.

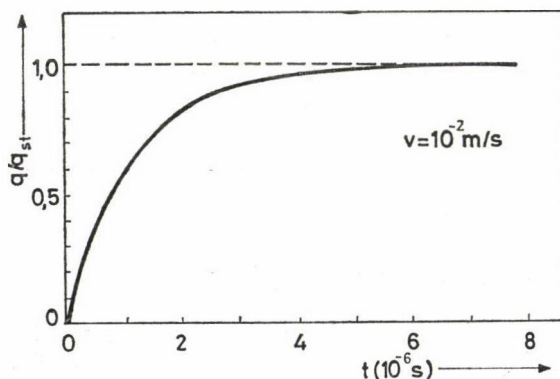
3.221. A számítási módszer numerikus vizsgálata

A számítási technikával kapcsolatos vizsgálatok során elsőként azt tanulmányoztam, hogy a (3.83) stacionárius megoldás esetén hogyan függ a végeredmény az alkalmazott hálómérettől (M és N a 3.22. ábrán). A 3.25. ábrán egy kis (1 görbe) és nagy (2 görbe) diszlokációsebesség (ennek megfelelően magas és alacsony diszlokációtöltés) esetén kapott eredményeket mutatok be. A háló négyzetes, a diszlokáció a háló közepén helyezkedik el. Látható, hogy az $M=N=5$ hálómérettől kezdődően a végeredmény gyakorlatilag nem változik. A további számításokat $M=N=7$ értékkel végeztem.

Ezután az időben változó folyamatra érvényes (3.82) egyenletek segítségével megvizsgáltam, hogyan alakul ki időben a stacionárius állapot, és ezt összevettem a (3.83) egyenletekből kapott stacionárius megoldással. A 3.26. ábrán az időben változó q töltés és a stacionárius egyenletekből kapott q_{st} érték hányadosának időbeli változása látható $v=10^{-2}$ m/s diszlokáció sebesség esetén az alább ismertetendő LiF kristályban. Az időben változó töltés láthatóan jól közelíti a stacionárius megoldásból kapott értékhez. Ebből az ábrából és több hasonló számítás eredményéből az is látható, hogy a mozgó diszlokáción a stacionárius érték kialakulása a kristály méreténél nagyságrendekkel kisebb távolságon bekövetkezik, tehát a stacionárius



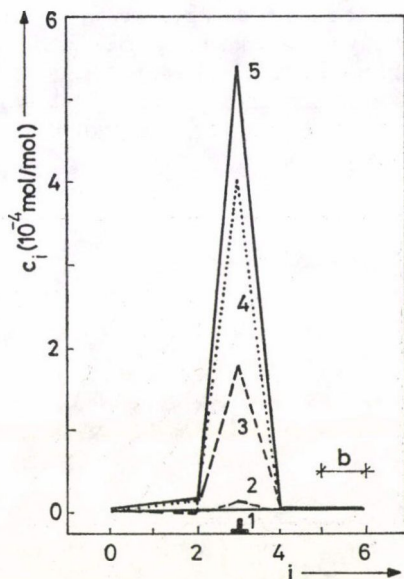
3.25. ábra. A (3.83) egyenletrendszerből számított diszlokációtöltés (q) függése az alkalmazott hálómérettől



3.26. ábra. A (3.82) instacionárius egyenletekkel számított q töltés és a (3.83) egyenletekből kapott q_{st} stacionárius érték hányadosának időbeli változása $v=10^{-2}$ m/s diszlokációsebességnél (a diszlokáció töltés nélkül indul). A stacionárius állapot mintegy $7 \cdot 10^{-8}$ m út befutása után alakul ki

megoldás használata jogos. Ennek megfelelően számításaimban a kisebb gépidőt igénylő (3.83) stacionárius módszert használtam.

Végül annak illusztrálására, hogy a többlet vakanciák gyakorlatilag a diszlokáció közvetlen környezetében gyűlnek össze, a 3.27. ábrán bemutatom a diszlokáció körül felvett háló csúszási sík feletti vonala (a 3.23. ábrán az X—X vonal) mentén kialakult vakanciaeloszlás időbeli változását. Hasonló az eloszlás az Y—Y vonal mentén is.



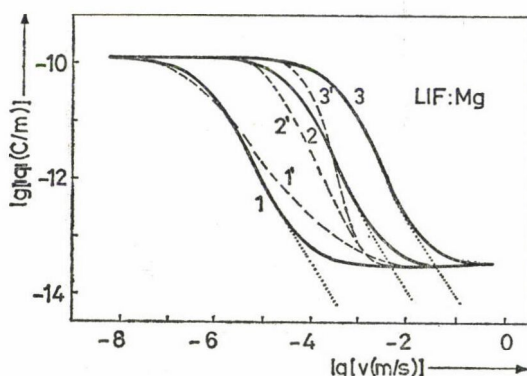
3.27. ábra. A 3.23. ábra X—X vonala mentén kialakult vakanciaeloszlás időbeli változása. Az egyes görbékhez tartozó időpillanatok: 1 — 0 s, 2 — $4.8 \cdot 10^{-10}$ s, 3 — $4.1 \cdot 10^{-7}$ s, 4 — $1.49 \cdot 10^{-6}$ s, 5 — $7 \cdot 10^{-6}$ s (a diszlokáció töltés nélkül indul)

3.222. A diszlokációtöltés sebességfüggése

A diszlokációtöltésnek a diszlokáció sebességétől való függését kísérletileg Alsic és munkatársai (1975) vizsgálták. Mivel a diffúziós modell kidolgozásának alapjául éppen ezek az eredmények szolgáltak, elsőként a diszlokációtöltés sebességfüggését számítottam ki az említett kísérletekben használt 10^{-5} mol/mol Mg szennyezőst tartalmazó LiF kristályokra. A számításnál használt lényegesebb adatok és azok forrásai a következők voltak. $U_0 = 0,6$ eV (a töltés sebességfüggésének kis sebességeknél fellépő határértékéhez (Alsic és munkatársai 1975) történő illesztés szobahőmérsékleten), $v_0 = 5 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$, $H = 0,65$ eV (mindkét adat Haven 1950), $H_a = 0,4$ eV (Stoebe és Pratt 1967), $q_\infty = 3,2 \cdot 10^{-14} \text{ C/m}$ (Alsic és munkatársai 1975).

A számítás eredményeit az Alsic és munkatársai által alkalmazott három hőmérsékleten a 3.28. ábra folytonos vonalakkal kihúzott görbéi mutatják. Összehasonlításként szaggatott vonallal feltüntettem az említett szerzők mérési eredményeit is. Bár a mért és számított töltéserőértékek között jelentős eltérések is vannak, az összehasonlítás mégis a diffúziós mechanizmus reális voltát igazolja:

- az elméleti görbék jellege (abban a tartományban, ahol a diffúziós modell egyáltalán működhet) azonos a kísérleti görbék jellegével,
- a jelleg azonossága mellett a töltés csökkenésének kezdetét jelentő kritikus sebességek nagyságrendileg egyeznek a kísérleti értékekkel,
- a felső telítési érték mindhárom vizsgált hőmérsékleten igen jól egyezik a kísérletekkel (ezek közül csak a szobahőmérsékleti érték illesztés eredménye, a többi nem). Az illesztéssel kapott $U_0 = 0,6$ eV érték jól egyezik az atomisztikus számítások eredményével (1.5. pont).



3.28. ábra. A diszlokációtöltés (q) függése a diszlokációsebességtől (v) 10^{-6} mol/mol Mg szennyezést tartalmazó LiF kristályban különböző hőmérsékleteken. A folytonos vonalak számítás eredményei, a szaggatott vonalak Alsic és munkatársai (1975) mérési eredményeinek felelnek meg. A hőmérsékletek: 1 és 1' — 293 K, 2 és 2' — 373 K, 3 és 3' — 423 K. A pontozott vonalak mutatják a töltést nagy sebességeknél, ha csak a diffúziós hatást vesszük figyelembe (vö. 3.212 pont)

Az eltérések értékelésénél figyelembe kell venni, hogy a plasztikus deformáció folyamata igen bonyolult, és a fenti modellben kellő információk hiányában nem tudtam figyelembe venni néhány lényeges effektust, amelyek a mérésekben minden bizonnyal szerepet játszanak. Ezek közé tartozik a deformáció során fellépő vakanciakeltés, amely nemkonzervatív lépcsőmozgás eredménye (Sprackling 1976). E folyamat során egyenlő számú kation és anion vakancia keletkezik, a többlet vakanciák mennyisége a deformációsebességgel és a diszlokációsűrűséggel nő. Szobahőmérsékleten a keletkező vakanciák száma jelentősen felülmúlhatja a szennyezett kristály egyensúlyi vakanciakonzentrációját is (Andrejev és Szmirnov 1968, Andrejev 1980, 1981). A szobahőmérséklet közelében ez az effektus a felszedhető kation vakanciák számát jelentő-

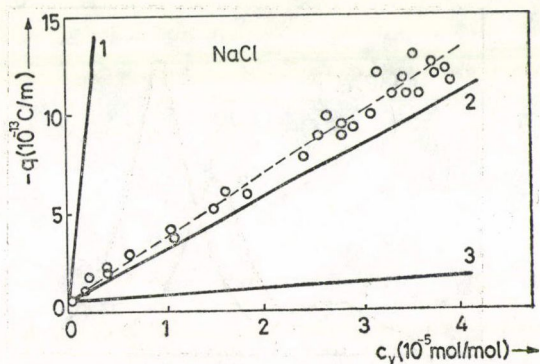
sen megnövelheti a nagyobb sebességek tartományában (az anion vakanciák nem játszanak szerepet, mert mozgékonyaságuk lényegesen kisebb, mint a kation vakanciáké; l. pl. Fuller 1972). Magasabb hőmérsékleten a többletvakanciák igen gyorsan kimennek a rácsból, ezért itt ez a növelő hatás nem érvényesül. A töltés látszólagos csökkenését eredményezheti, hogy a diszlokáció valódi sebességét a méréseknél alábecslik a diszlokáció szakaszos mozgása miatt (Kocks és munkatársai 1975). Sajnos, a reális diszlokáció mozgásról keveset tudunk, de a várakozási idő a legtöbb becslés szerint jóval nagyobb a tényleges futási időnél, vagyis a reális mozgási sebesség nagyobb a makroszkopikusan mérhető effektív sebességnél (Rozsanszkij és munkatársai 1963, Schöck 1980).

Mindezt figyelembe véve, a kísérleti és elméleti eredmények egyezése jónak mondható, az pedig egyértelműen bizonyosodott, hogy a diffúziós mechanizmus alkalmas a kísérletileg tapasztalt legnagyobb töltések létrehozására is.

3.223. A diszlokációtöltés függése a kation vakanciák koncentrációjától

A 3.143. pontban ismertetett kísérleti eredményeim szerint szobahőmérsékleten a diszlokációk által szállított q töltés arányos a kristályban levő szabad kation vakanciák c_v koncentrációjával. A diffúziós modell segítségével ezt az összefüggést is megvizsgáltam. Az alkalmazott paraméterek és forrásaik a következők. $U_0 = 0,6$ eV (illesztés a maximálisan felszedhető töltéshez; Alsic és munkatársai 1975, Huddart és Whitworth 1973), $v_0 = 4,91 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$, $H = 0,65$ eV, $H_a = 0,31$ eV (mindhárom adat Fuller 1972), $q_\infty = 6,4 \cdot 10^{-14} \text{ C/m}$ (a kísérleti $q - c_v$ összefüggés $c_v = 0$ esetre extrapolált értéke; 3.143. pont).

Az eredmények különböző diszlokációsebességek esetén a 3.29. ábrán láthatók (folytonos vonalak). Az összehasonlítás kedvéért berajzoltam mérési eredményeimet is (itt az összes mérési pontot egységesen körrel jelöltem). Mint látható, a számítás



3.29. ábra. A diszlokációtöltés (q) függése a kristályban levő kation vakanciák koncentrációjától (c_v) különböző diszlokációsebességek esetén NaCl kristályban. A vonalak számítás eredményei, a pontok mérési eredmények (l. 3.16. ábra). A számításnál használt sebességértékek: 1 — 10^{-6} m/s, 2 — 10^{-5} m/s, 3 — 10^{-4} m/s

eredményei visszaadják a diszlokációtöltés és a kation vakanciák koncentrációja között kísérletileg tapasztalt lineáris összefüggést. A számítások alapján megbecsülhető az is, hogy méréseim során mennyi lehetett a diszlokációk átlagos sebessége. Az ábra alapján kapható $v \approx 10^{-5}$ m/s érték reálisnak tűnik.

Ez az eredmény megerősíti az előző pontban mondottakat: a diffúziós mechanizmusra épülő modell a vizsgált kísérleti eredmények legfontosabb jellegzetességeit értelmezni tudja, így ezt a mechanizmust feltétlenül a töltéstranszport egy lehetséges módjának kell tekintenünk.

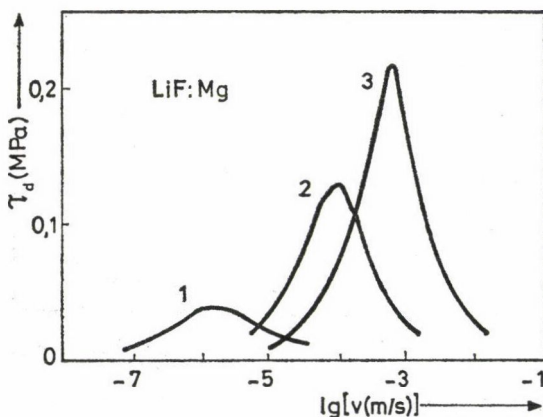
3.224. A szállított töltés fékező hatása a diszlokációra

Az irodalomban számos próbálkozás történt a diszlokáció töltéséből származó folyáshatár-járulek meghatározására (1.3. pont). Ezek a számítások azonban sztatikus viszonyok feltételezésén alapultak, így az eredmények mozgó diszlokáció esetére nem alkalmazhatók. A diffúziós modell lehetőséget ad a mozgó diszlokációra a szállított töltés miatt fellépő fékező erő kiszámítására is. A számítás alapelve (Cottrell és Jaswon 1949) az, hogy egy kation vakancia és az x irányban mozgó diszlokáció között fellépő erő az U kölcsönhatási energiából az

$$f = \frac{\partial U}{\partial x} \quad (3.98)$$

összefüggéssel kapható meg. Egy l hosszúságú diszlokáció szakaszra a diszlokáció körül felvett háló (i, j) pontjához tartozó, $s^2 l$ térfogatban levő vakanciák által kifejtett f_{ij} fékező erő a

$$\frac{\partial U_{ij}}{\partial x} = \frac{\partial U}{\partial x} |(i, j) \quad (3.99)$$



3.30. ábra. A diszlokációra a vakanciaszállítás miatt fellépő fékezőfeszültség (τ_d) a diszlokációsebesség (v) függvényében különböző hőmérsékleteken (1 — 293 K, 2 — 373 K, 3 — 423 K)

jelölés bevezetésével

$$f_{ij} = \frac{s^2 l}{\Omega} c_{ij} \frac{\partial U_{ij}}{\partial x}, \quad (3.100)$$

ahol Ω az egy vakanciára jutó térfogat, c_{ij} a vakanciák atomi koncentrációja az (i, j) pontban. Innen az egységnyi hosszúságú diszlokációs szakaszra ható teljes fékező erő

$$\frac{1}{l} \sum_{i,j} f_{ij} = \frac{s^2}{\Omega} \sum_{i,j} c_{ij} \frac{\partial U_{ij}}{\partial x} \quad (3.101)$$

(az összegzés a háló pontjaira történik). Végül a csúszási síkban működő fékező feszültség (τ_d) nagysága

$$\tau_d = \frac{s^2}{b\Omega} \sum_{i,j} c_{ij} \frac{\partial U_{ij}}{\partial x}. \quad (3.102)$$

A fenti módszerrel kiszámítottam a 10^{-5} mol/mol Mg szennyezést tartalmazó LiF kristályban a fékező erőnek a diszlokáció sebességétől való függését három különböző hőmérsékleten. Az eredmények (3.30. ábra) azt mutatják, hogy a töltésszállításból származó fékező erő függ a diszlokáció sebességétől, és a feszültség maximuma a hőmérséklettel nő a vizsgált hőmérséklet-tartományban. A maximális fékező feszültség a hőmérséklettől függően a kritikus csúsztatófeszültségnek mintegy 3–15%-a lehet (a vizsgált hőmérséklet-intervallumban a kritikus csúsztatófeszültség hasonló szennyezésű LiF kristályban $\tau_c \approx 1,5$ MPa; *Blisztanov és munkatársai 1972*).

4. MOZGÓ DISZLOKÁCIÓK ÉS SZENNYEZŐ—VAKANCIA-PÁROK KÖLCSÖNHATÁSA

A diszlokációk és a szennyező—vakancia (SzV)-párok kölcsönhatása alkáli halogenid kristályokban jelentősen befolyásolja a kritikus csúsztató feszültséget (2. fejezet). A kritikus csúsztató feszültségnek (KCsF) ez a járuléka két egymástól lényegesen eltérő mechanizmus révén jön létre. Alacsony hőmérsékleten, ahol a SzV-párok gyakorlatilag mozgásképtelenek, a diszlokációkat fékező hatás a SzV párokkal történő rövidtávú kölcsönhatásból származik. Ez a kölcsönhatás adja a KCsF Fleischer-járulékát (2.2. pont). Magasabb hőmérsékleten, ahol a SzV-párok már forgásképesek, a fékező hatás kiegészül az indukált Snoek-effektussal, amely abban áll, hogy a SzV-párok a diszlokációk feszültségterének hatására energetikailag kedvező orientációt igyekeznek elfoglalni, és az így kialakult SzV—pár-felhő a diszlokációk továbbmozgását gátolja. Ebből származik a KCsF Snoek-járuléka (2.3 pont).

A Fleischer-járuléka kísérleti vizsgálatát az effektív feszültség méréseivel többen is elvégezték. Ezzel szemben a Snoek-járulékra csak a teljes KCsF-ből erősen vitatható becsléssel kapott adatok ismeretesek (2.4. pont). Ezért kísérleteim célja az volt, hogy az effektív feszültség szobahőmérsékleten történő méréseivel meghatározzam a KCsF Snoek-járulékát. A méréseket különböző szennyezőket tartalmazó NaCl kristályokon végeztem, ami lehetőséget ad a különböző SzV-párok rácsorzító hatásának összevetésére is.

E témakörben végzett elméleti munkám során — a diszlokáció—ponthiba-kölcsönhatás kontinuum elméletének keretein belül maradván — a SzV-párok KCsF-

járlékának számításával foglalkoztam, és a korábbi számításokat három vonatkozásban tökéletesítettem. Egyszerű atomi modellel kiszámítottam a SzV-pár körül létrejött ionelmozdulásokat, és megbecsültem a SzV-párt jellemző dilatációs tenzort. Ezzel lehetővé vált a diszlokáció és SzV-pár kölcsönhatásának számításánál illesztési paraméterként használt „tetragonális” (2.2. pont) kiküszöbölése. A KCsF-járlék számításánál az irodalomban szokásos eljárástól eltérően, a különböző orientációjú és a csúszási síktól különböző távolságban levő SzV-párokat különböző fékező centrumnak tekintettem, és együttes hatásukat elméletileg megalapozott összegzési módszerrel vettem figyelembe. Végül a 2.3. pontban ismertetett szimulációs módszerrel kiszámítottam a KCsF Snoek-járlékát kíséretekkel összevethető esetekben.

4.1. A szennyező—vakancia-párok kritikus csúsztatófeszültség-járlékának kísérleti vizsgálata

A SzV-párok KCsF-járléka az effektív feszültséggel azonosítható, ezért kísérleti vizsgálataim során az effektív feszültséget határoztam meg kis szennyezéstartalmú NaCl kristályokban. A méréseket szobahőmérsékleten végeztem, mert célom a KCsF Snoek-járlékának vizsgálata volt (szobahőmérsékleten a SzV-párok KCsF-járlékát lényegében a Snoek-effektus adja; 2.3. pont). A méréseknél különböző kétvegyértékű kation szennyezőket tartalmazó kristályokat használtam, és megvizsgáltam az effektív feszültségnek a szennyező típusától való függését is.

4.11. Az effektív feszültség mérése

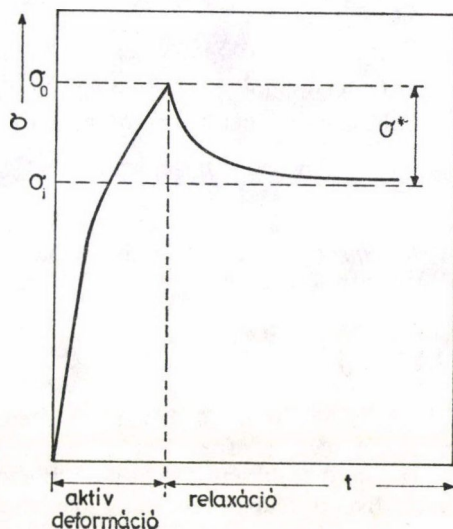
Az effektív feszültség meghatározására szolgáló módszerek (Conrad 1970) közül a feszültségrelaxáció módszerét választottam, amelyet alkáli halogenidek esetén több szerző (Li 1967, Gupta és Li 1970, Sprackling 1973, Appel 1974) alkalmazott, és a kiértékelésnél használt feltevések helyességét is ellenőrizték.

4.11.1. A mérési módszer

A feszültségrelaxáció módszeréről nemrégiben jelent meg Tasnádi (1980) összefoglaló munkája, ezért itt csak a mérési eljáráshoz szorosan kapcsolódó összefüggéseket ismertettem.

A módszer lényege az, hogy egy mintát plasztikusan — a konkrét esetben egytengelyű nyomással — deformálunk, majd az aktív deformációt megszüntetjük. Ekkor a nyomófeszültség időben csökkenni kezd, vagyis a mintában feszültségrelaxáció megy végbe. Ennek oka az, hogy a termikus aktiváció miatt a diszlokációk mozgása — és így a plasztikus deformáció is — tovább folytatódik. Közben a feszültség csökken, és a deformáció egyre lassúbbá válik. Végtelen hosszú idő alatt a diszlokációk az összes termikusan aktiválható lépést megteszik és a σ nyomófeszültség a σ_i belső feszültségnek megfelelő szintre csökken (4.1. ábra). Az effektív nyomófeszültség (σ^*) a relaxáció során bekövetkező feszültségcsökkenéssel egyenlő. Gyakorlatilag a relaxáció nem végtelen hosszú ideig tart, hanem addig, ameddig a feszültség változása még észlelhető. A feszültség teljes relaxációját azonban még a praktikus értelem-

ben sem célszerű megvárni. Ennek nemcsak az az oka, hogy a mérési idő így igen hosszú lenne, hanem elsősorban az, hogy a várakozás közben a megterhelt mintában szerkezeti változások mennek végbe, amelyek megváltoztatják a belső feszültséget (Guin és Pratt 1964). Ezért a keresett σ_i (illetve σ^*) értéket rendszerint a relaxációs görbe kezdeti szakaszából extrapolációval határozzák meg. Az extrapolációs formula az alábbi módon kapható meg.



4.1. ábra. Feszültségrelaxációs görbe és a kiértékelésnél használt jelölések

Tudjuk, hogy a relaxáció során a deformáló berendezésben és a mintában bekövetkező rugalmas deformációnak (ε_r) és a minta plasztikus deformációjának (ε_p) összege állandó

$$\varepsilon_r + \varepsilon_p = \text{állandó.} \quad (4.1)$$

Alkalmazzuk a \bar{v} átlagos diszlokáció sebesség és az $\dot{\varepsilon}_p$ deformációsebesség között fennálló

$$\dot{\varepsilon}_p = \phi \rho_m b \bar{v}. \quad (4.2)$$

Orowan (1940)-féle összefüggést (ϕ orientációs faktor, ρ_m a mozgásképes diszlokációk sűrűsége, b a Burgers-vektor nagysága). Végül használjuk fel a diszlokációsebesség és a nyomófeszültség között fennálló (Johnston és Gilman 1959)

$$v = B(\sigma - \sigma_i)^{m^*} \quad (4.3)$$

empirikus összefüggést (B és m^* konstansok). Ha feltételezzük, hogy a relaxáció során a ρ_m diszlokációsűrűség és a σ_i belső feszültség állandó, a nyomófeszültség időbeli változására a (4.1)–(4.3) egyenletekből a

$$\sigma(t) = \sigma_i + K'(t + t_0)^{\frac{1}{1-m^*}} \quad (4.4)$$

kifejezés adódik (Li 1967, Gupta és Li 1970), ahol K' és t_0 konstansok. Felhasználva a nyomófeszültség és a csúsztatófeszültség között fennálló (Kovács és Zsoldos 1965)

$$\tau = \phi\sigma \quad (4.5)$$

összefüggést (az orientációs faktor NaCl rácsban $\{110\} \langle 110 \rangle$ csúszási rendszerre $\phi=0,5$), a csúsztatófeszültségre kapjuk

$$\tau(t) = \tau_i + K(t+t_0)^{\frac{1}{1-m^*}}, \quad (4.6)$$

ahol $K=\phi K'$.

A K , t_0 és m^* konstansok, valamint a τ_i belső feszültség a (4.6) összefüggésnek a kísérleti görbékhez történő illesztésével határozhatók meg. A τ^* effektív feszültség a

$$\tau^* = \tau(0) - \tau_i \quad (4.7)$$

összefüggésből kapható.

A K , t_0 , m^* és τ_i paraméterek illesztésére a direkt eljárás helyett az irodalomban szokásos (Gupta és Li 1970, Sprackling 1973) módszert használtam. A csúsztatófeszültség időderiváltjának logaritmusát véve a

$$\lg\left(-\frac{d\tau}{dt}\right) = \frac{m^*}{1-m^*} \lg(t+t_0) + \text{konst} \quad (4.8)$$

összefüggést kapjuk, ami lehetővé teszi az m^* és t_0 paraméterek viszonylag egyszerű meghatározását. Ha ugyanis a mért $\tau(t)$ függvényt numerikusan differenciáljuk, és felvesszük a $\lg(-d\tau/dt) - \lg(t+t_0)$ grafikont, akkor a paraméterek helyes értéke mellett egyenest kell kapnunk. Mivel általában t_0 néhány másodperc körüli érték, az m^* paraméter a $\lg(-d\tau/dt) - \lg t$ grafikon $t \gg t_0$ pontjaihoz illesztett egyenesből megkapható (ekkor ugyanis t_0 elhanyagolható). Ezután a még ismeretlen t_0 értéket abból a feltételből kapjuk meg, hogy a (4.8) összefüggés szerint a $\lg(-d\tau/dt) - \lg(t+t_0)$ grafikonnak kis t értékeknél is egyenest kell adnia.

A τ_i belső feszültség ezután már könnyen meghatározható. Ha ugyanis a relaxációs görbe két különböző t_1 és t_2 időponthoz tartozó τ_1 és τ_2 feszültségértékét leolvassuk, akkor ezekre a (4.6) egyenlet szerint teljesül a

$$\frac{\tau_1 - \tau_i}{\tau_2 - \tau_i} = \left(\frac{t_1 + t_0}{t_2 + t_0}\right)^{\frac{1}{1-m^*}} \quad (4.9)$$

összefüggés. Az m^* és t_0 ismeretében innen τ_i kiszámítható, majd a (4.7) összefüggés alapján a keresett τ^* effektív feszültség is megkapható.

Az effektív feszültséget a fenti módszerrel határoztam meg. Mivel az effektív feszültség deformálatlan mintában nem határozható meg, felvettem a $\tau^*(\gamma_p)$ függést (γ_p a plasztikus nyírás) és a $\gamma_p=0$ esetre extrapolált τ^* értékeket használtam.

A deformáció során az erő $F(t)$ időfüggését kaptam meg, és ebből a mindenkor γ_p valódi deformációt és a τ valódi feszültséget az alábbi módon határoztam meg (Sprackling 1976, Alsem 1981).

A mintát nyomó lapok távolságának Δl változása a minta és a berendezés rugalmas (Δl_r) és a minta plasztikus (Δl_p) hosszváltozásából áll

$$\Delta l = \Delta l_r + \Delta l_p. \quad (4.10)$$

Ha a minta és a nyomóberendezés együttes rugalmas állandója K_e , a kereszttrúd mozgási sebessége pedig v_c , akkor (4.10) alapján a teljes plasztikus összenyomódás mint az idő függvénye

$$\Delta l_p = v_c t - \frac{F(t)}{K_e}. \quad (4.11)$$

Ebből egyrészt meghatározható a plasztikus nyírás sebessége

$$\dot{\gamma}_p = \frac{1}{\phi l} \left(v_c - \frac{1}{K_e} \frac{dF(t)}{dt} \right) \quad (4.12)$$

(ϕ a már említett orientáció faktor, l a minta mindenkori hossza), másrészt pedig a minta valódi teljes nyírási deformációja

$$\gamma_p = \frac{1}{\phi} \ln \left(1 - \frac{\Delta l_p}{l_0} \right) \quad (4.13)$$

(l_0 a minta eredeti hossza). Végül a $\tau(t)$ pillanatnyi nyírófeszültséget a

$$\tau(t) = \phi \frac{F(t)}{A_0} (1 - \phi \gamma_p) \quad (4.14)$$

kifejezés adja (A_0 a minta eredeti keresztmetszete).

A minta és a berendezés együttes rugalmas állandóját a

$$K_e = \frac{E}{\frac{E}{K} + \frac{l_0(1 - \phi \gamma_p)}{A_0}} \quad (4.15)$$

összefüggés (Tasnádi 1980) adja meg, ahol K a berendezés rugalmas állandója, E a kristály Young-modulusa.

4.112. Kísérleti technika

A méréseknél a 3.121. pontban ismertetett OH^- -mentes kristályokat használtam, amelyek Ca, Sr vagy Ba szennyezőt tartalmaztak. A vizsgálatokhoz azonos ($c \approx 10^{-5}$ mol/mol) szennyezéstartalmú mintákat választottam. A kis szennyezéskonzentráció az aggregáció elkerülése miatt lényeges. Kisebb szennyezéstartalom választása azért nem célszerű, mert ekkor a szennyezők KCSF-járléka már nagyon kicsi, másrészt a szennyezéstartalom meghatározása is nehezebb. Az alkalmazott szennyezéseknél szobahőmérsékleten a SzV-párok koncentrációja gyakorlatilag megegyezik a szennyezéskonzentrációval. A szennyezéskonzentráció meghatározása vezetőképesség-méréssel (3.124. pont) történt abban a hőmérséklet-tartományban, ahol a kation vakanciák koncentrációja gyakorlatilag egyenlő a szennyezéskonzentrációval (disszociációs tartomány). A vakanciakonzentrációt az ionvezetőképességből a (3.58), (3.59) összefüggések segítségével határoztam meg.

A minták készítése a 3.121. pontban leírt módon történt. A mintaméretet úgy választottam meg, hogy a mérési eredmények ne függjenek a méretektől. Mint

Skrotzki (1979) kimutatta, a méretfüggés eltűnik, ha a minta magassága az alaplap oldalhosszának legalább 2,7-szerese. Ezért a minták néhány tized milliméter pontossággal $3 \times 3 \times 10 \text{ mm}^3$ méretűek voltak. Az összenyomás a leghosszabb éllel párhuzamos $\langle 100 \rangle$ irányban történt. Az axiális terhelés biztosítása érdekében a minta felső lapjára egy acél félgömböt helyeztem el, amelynek sík lapja a mintához, félgömb oldala pedig a nyomóberendezés nyomólapjához csatlakozott (in der *Schmitt* és *Haasen* 1961, *Hesse* 1965, *Sprackling* 1973).

A relaxációméréseket INSTRON berendezéssel végeztem összenyomás-üzem-módban. A használt erőmérő cella $0,02 \text{ N}$ erő érzékelésére is alkalmas volt, ami az alkalmazott mintaméretnél kb. $0,002 \text{ MPa}$ feszültséget jelent (a relaxált feszültség néhány tized MPa nagyságrendű). A berendezés rugalmas állandója $K = 8,1 \cdot 10^6 \text{ N/m}$ volt. Az erő—idő görbét vonaliró regisztrálta, a deformációt és a deformációsebességet a keresztrúd sebességéből számítottam ki az előző pontban leírt módon. A keresztrúd sebességét $v_c = 0,1 \text{ mm/min}$ értékűnek választottam. *Guin* és *Pratt* (1964) szerint a berendezés relaxációját csak ennél nagyobb sebességeknél kell figyelembe venni, ennek ellenére a mérés közben több alkalommal végeztem ellenőrző vizsgálatot. A mintát egy hosszabb relaxáció után tehermentesítettem, majd a relaxált erőnél valamivel kisebb erővel újra megterheltem, és regisztráltam a relaxációt. Az ilyenkor kapott relaxáció 1–2 s alatt lejátszódott és a teljes relaxációnak csupán néhány százaléka volt.

A helyiség hőmérsékletének ($\approx 25^\circ \text{C}$) stabilizálása érdekében a berendezést a mérés megkezdése előtt legalább egy órával bekapcsoltam, és a relaxációs görbék felvétele zárt helyiségben történt [*Gupta* és *Li* (1970) tapasztalatai szerint a relaxációs görbe alakját $0,1^\circ \text{C}$ nagyságrendű hőmérsékletváltozások is eltorzíthatják].

Egy mintán a terhelés fokozatos növelésével 4–7 relaxációs mérést hajtottam végre. Egy relaxációs görbe felvétele kb. 4–5 percig tartott.

4.12. Az effektív feszültség függése a szennyező típusától

Mielőtt ismertetném a kísérletek tulajdonképpeni végeredményét, vagyis az effektív feszültségnek a szennyező típusától való függését, néhány, a kiértékeléssel kapcsolatos eredményt is bemutatok. Ennek egyik célja a kiértékelés menetének ismertetése, a másik pedig a részeredmények összevetése korábbi irodalmi tapasztalatokkal, és így a mérések egyfajta ellenőrzése.

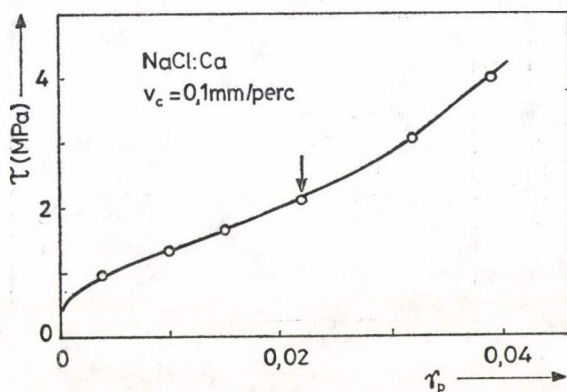
Méréseket háromféle szennyező (Ca, Sr, Ba) esetén, és minden szennyezőnél több mintán végeztem. A közbülső eredmények bemutatására egy Ca-mal szennyezett NaCl minta egyik relaxációs görbáját választottam ki. A többi mintánál hasonló eredményeket kaptam.

A példaként választott minta $\tau - \gamma_p$ görbéje a 4.2. ábrán látható, ahol körök jelzik azokat az állapotokat, ahol a relaxációs mérést végeztem. Ezek közül a nyíllal jelölt eset eredményeit mutatom be.

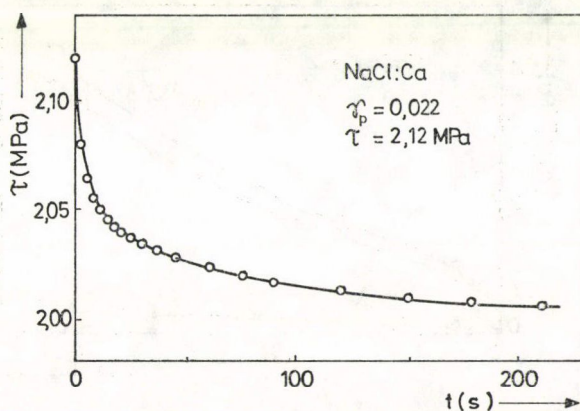
A 4.3. ábrán látható a relaxációs görbe, amely a τ csúsztató feszültség időbeli változását mutatja az első néhány percben. A 4.3. ábrából a korábban ismertetett módon kaptam a 4.4. ábra $\lg(-d\tau/dt) - \lg(t + t_0)$ grafikonját. Az eredeti relaxációs görbéből kapott értékek a $t_0 = 0$ esetnek felelnek meg, és az ábrán a megfelelő pontokat sötét körök jelzik. Az m^* paraméter a nagyobb t értékekhez tartozó pontokhoz illesztett egyenes meredekségéből kapható. Az eredeti pontokból a t_0 paraméter meg-

határozása után adódnak az üres körökkel jelölt pontok. Ismerve a t_0 és m^* értékeket; a relaxációs görbe két pontjából a (4.9) összefüggés felhasználásával kiszámítható a τ_i belső feszültség is. Végül a keresett τ^* effektív feszültséget a (4.7) összefüggés adja meg. A t_0 paraméter értéke az esetek többségében 1-2 s körüli érték volt, m^* függ a deformációtól (l. alább).

A τ , τ_i és τ^* deformációtól való függését mutatja a fenti minta esetén a 4.5. ábra. A korábbi mérésekkel (Gupta és Li 1970, Sprackling 1973, Appel 1974) összhangban az effektív feszültség kismértékben függ a deformációtól, és a teljes feszültségnek csak kis hányadát adja. Az alakítási keményedés tehát lényegében a belső feszültség növekedéséből származik. Az a tény, hogy az effektív feszültség kissé deformációfüggő arra utal, hogy a deformáció során új lokális akadályok jönnek létre;



4.2. ábra. Ca-mal szennyezett NaCl kristály nyírófeszültség (τ) nyírási deformáció (γ_p) görbéje. A körökkel jelölt állapotokban relaxációs mérés történt, a nyíllal jelölt eset kiértékelését alább bemutatom

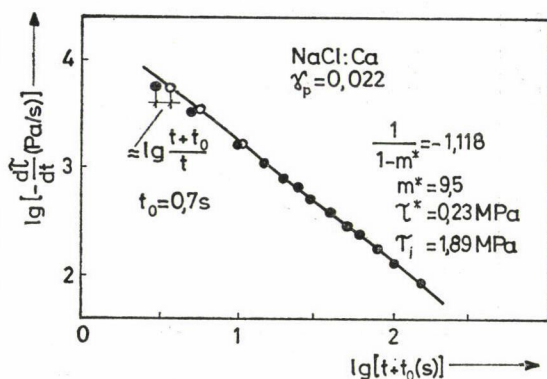


4.3. ábra. Jellemző relaxációs görbe Ca-mal szennyezett NaCl kristályban szobahőmérsékleten

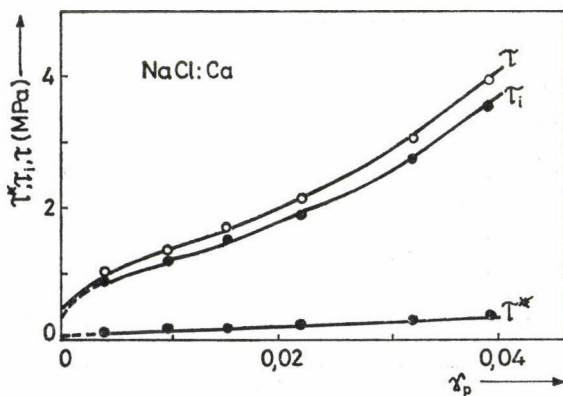
amelyek Appel (1975, 1980) szerint a csúszási síkot átdöfő diszlokációk. Emiatt a SzV-párok járuléka a mérésből csak kis deformáció esetén kapható meg.

Az m^* értékek szórása jelentős, így a deformációtól való függés jellege nehezen állapítható meg. A 4.6. ábrán három minta esetén kapott értékek láthatók. A diszlokációmozgás közvetlen megfigyeléséből kapott irodalmi m^* értékek előzetesen nem deformált kristályokban 4 és 17 között változnak (Sprackling 1976). Az ábrán látható sáv kis γ_p értékeknél 8 és 10 közötti értékeket ad, vagyis a közvetlen mérésekből kapott eredmények intervallumának közepébe esik.

Az összes relaxációs görbe kiértékelése után kapott $\tau^* - \gamma_p$ grafikont mutatja a 4.7. ábra Ca, Sr és Ba szennyezőt tartalmazó 3—3 minta esetén. Az ábrán az egyes szennyezőkhöz tartozó pontokhoz egyenest illesztettem, és a τ^* értékeket extrapolál-

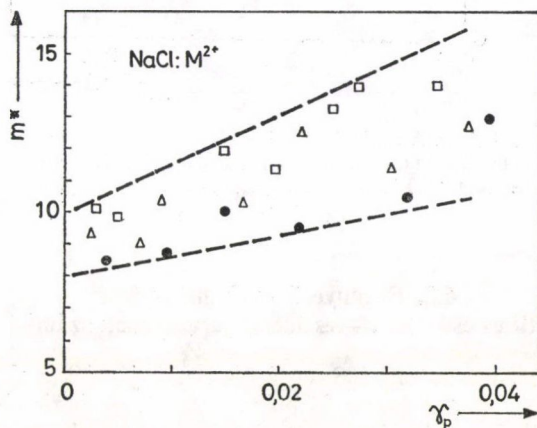


4.4. ábra. A 4.3. ábra relaxációs görbéjének differenciálhányadosa az idő függvényében logaritmikus léptékben (az m^* és t_0 konstansok meghatározásához)

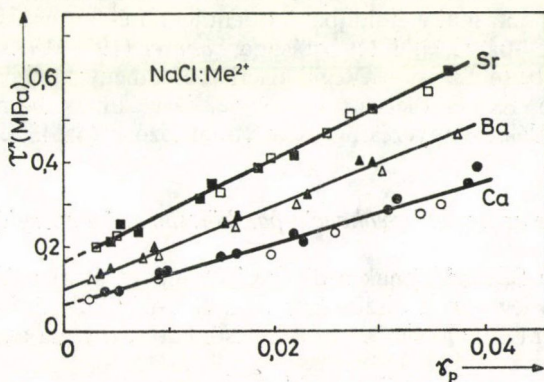


4.5. ábra. A teljes nyírófeszültség (τ), a belső feszültség (τ_i) és az effektív feszültség (τ^*) függése a nyírási deformációtól (γ_p) Ca-mal szennyezett NaCl kristályban

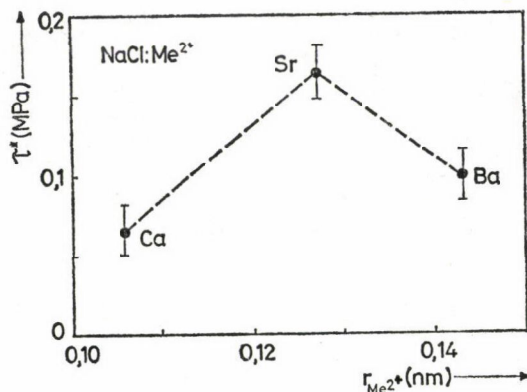
tam a $\gamma_p=0$ esetre. Az extrapolált értékeket fogadtam el a SzV-párok járulékának; amelyeket a szennyező ionsugarának függvényében a 4.8. ábrán tüntettem fel. A mérés maxiális hibája, amely elsősorban a relaxációs görbe ingadozásaiból és a numerikus differenciálásból adódik: $\pm 0,016$ MPa. Ez azt mutatja, hogy az egyes szennyezők esetében kapott τ^* értékek eltérése szignifikáns. A Sr szennyezőhöz tartozó kiugró érték, amelyet a teljes KCsF mérése is mutatott (Sárközi és munkatársai 1982), arról tanúskodik, hogy a SzV-pár rácsorzító hatása a szennyező ion méretétől bonyolult módon függ. Ennek az eredménynek elméleti értelmezésével a 4.24. pontban foglalkozom.



4.6. ábra. Az m^* konstans függése a nyírási deformációtól (γ_p) különböző kétvegyértékű kation szennyezőt tartalmazó NaCl kristályokban. A szennyezők: ● — Ca, □ — Sr, △ — Ba



4.7. ábra. Az effektív feszültség (τ^*) függése a nyírási deformációtól (γ_p) különböző szennyezőt tartalmazó NaCl kristályokban. A szennyezők: ●, ○, ○ — Ca; ■, ■, □ — Sr; ▲, ▲, △ — Ba. Az egyes szennyezőknél a különböző jelek különböző mintát jelentenek



4.8. ábra. A nulla deformációra extrapolált effektív feszültség (a szennyezők KCsF járuléka) függése a szennyező ionsugarától ($r_{Me^{2+}}$) NaCl kristályban szobahőmérsékleten

4.2. Szennyező—vakancia-párok kritikus csúsztató—feszültség-járulékának számítása

A 2. fejezetben ismertettem a SzV-párok KCsF-járulékának számításával foglalkozó elméleti munkákat és azok fő hiányosságait. A diszlokáció—SzV-pár kölcsönhatásának elméleti vizsgálatával kapcsolatos munkám célja az említett hiányosságok egy részének kiküszöbölése volt. Ennek érdekében számítási módszert dolgoztam ki a SzV-párt jellemző dilatációs tenzor meghatározására (4.21. pont), majd a kapott tenzor (4.241. pont) felhasználásával meghatároztam a SzV-párok KCsF-járulékát különböző kétvegyértékű kation szennyezőket tartalmazó NaCl kristályokban 0 K-en (4.242. pont). A számításnál a különböző orientációjú és a csúszási síktól különböző távolságban levő SzV-párok együttes hatását a Labusch (1970, 1972)-féle elmélet alapján vettem figyelembe (4.22. pont). Végül kísérleti eredményekkel összevethető számításokat végeztem a KCsF Fleischer- és Snoek-járulékának hőmérsékletfüggésére, illetve a Snoek-járulék szennyezésfüggésére vonatkozóan (4.243. és 4.244. pont).

4.21. Diszlokáció és szennyező—vakancia-pár kölcsönhatási energiája

Ahhoz, hogy a SzV-pároknak a diszlokáció mozgását akadályozó hatását számítani tudjuk, szükség van a diszlokáció és a SzV-pár kölcsönhatási energiájának ismeretére. A kontinuum elméletben ez a kölcsönhatási energia az

$$U_K = - \sum_{i,j} \int_V \sigma_{ij}^D \varepsilon_{ij} dV \quad (4.16)$$

összefüggéssel (Kovács 1970) adható meg, ahol σ_{ij}^D a diszlokáció feszültségtere, ε_{ij} a SzV-pár által okozott deformáció, V pedig a kristály térfogata. A probléma egyszerűsítése érdekében alkalmazom az irodalomban szokásos eljárást (Frank 1967). Felté-

telezem, hogy a SzV-pár által létrehozott deformáció csak egy kis V_H térfogaton belül különbözik nullától, továbbá, hogy ezen a térfogaton belül a diszlokáció feszültségterének változása elhanyagolható. Ekkor a SzV-párt jellemző $\bar{\epsilon}_{ij}$ átlagos dilatációs tenzor

$$\bar{\epsilon}_{ij} = \frac{1}{V_H} \int_{V_H} \epsilon_{ij} dV, \quad (4.17)$$

amellyel a kölcsönhatási energia az

$$U_K = -V_H \sum_{i,j} \sigma_{ij}^D \bar{\epsilon}_{ij} \quad (4.18)$$

alakba írható.

A diszlokáció feszültségtenzorának σ_{ij}^D elemei ismertek, az $\bar{\epsilon}_{ij}$ tenzorkomponenseket azonban meg kell határozni. Az $\bar{\epsilon}_{ij}$ értékek megbecsülhetők a SzV-pár környezetében levő ionok elmozdulásának számításával, ezért először ezzel a kérdéssel foglalkozom.

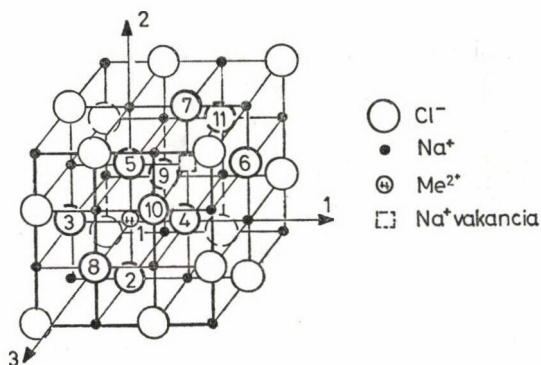
4.211. A szennyező—vakancia-pár körüli ionelmozdulások

Egy hiba körül létrejött ionelmozdulások a hibás kristályrács atomisztikus tárgyalásával határozhatók meg. A számítás nyilvánvalóan nem terjeszthető ki a teljes kristálytérfogatra, hanem csak a kristály akkora részére, amelynek tárgyalása egyszerű számítási munka elvégzésével lehetséges. Mivel célom az átlagos dilatációs tenzor közelítő meghatározása volt, a számítások mennyiségének csökkentése érdekében az ionelmozdulások számításánál a lehető legkisebb hibatérfogatot használtam. Ez természetesen a kölcsönhatási energia számításában hibát okoz. A hibatérfogat csökkentése egyrészt a valóságosnál nagyobb ionelmozdulásokat eredményez, ami a kölcsönhatási energiát növeli. Másrészt viszont a kisebb hibatérfogat önmagában kisebb kölcsönhatási energiát ad, vagyis két ellentétes előjelű hiba lép fel. E két hiba nagyságát megbecsülni igen nehéz, de a dilatációs tenzorra kapott eredmények azt mutatják (4.241. pont), hogy durván kompenzálják egymást.

A fenti közelítések miatt nem törekedtem az alkalmazott atomi modell részleteinek finomítására sem (ami növelte volna a számítások mennyiségét), ezért a számításokat az ionkristályok Born—Mayer modelljének (Born és Mayer 1932) hibás rácsra alkalmazott legegyszerűbb változatával, Mott és Littleton (1938) módszerével végeztem. Az ionok egyensúlyi helyzetét a pontszerűnek tekintett, polarizálható ionok között fellépő erők egyensúlyának megkeresésével határoztam meg. Ez a számítási módszer az elvét tekintve hasonló a korábban Reitz és Gammel (1951), illetve Bassani és Fumi (1954) által SzV-párokra alkalmazott módszerhez, azzal a lényeges eltéréssel, hogy a szennyező ion és az atomisztikusan számított többi ion elmozdulását egyidejűleg határoztam meg. Az említett szerzőknél ugyanis a szennyező ion és a vakancia helye rögzített volt, és az ionelmozdulásokat a szennyező ion és a vakancia körül egymástól függetlenül határozták meg. Emellett — a fenti szerzőktől eltérően, Kálmán és munkatársai (1980) tapasztalatai alapján — az ionok között működő erők számításánál a van der Waals kölcsönhatást is figyelembe vettem. Az alábbiakban ismertetem a módosított számítás főbb lépéseit.

A számításhoz a kristályt a szokásos módon (pl. Lidiard 1957) két tartományra osztottam fel. Az I. tartomány azokat az ionokat tartalmazza, amelyeknek elmozdu-

lását atomisztikusan számítom. Ide tartozik a szennyező ion (Me^{2+}) és a SzV-pár közvetlen közelében levő 10 Cl^- ion. Ezeket a 4.9. ábrán megszámoztam. A II. tartományba tartozik az összes többi ion, amelyek a tökéletes rácsban elfoglalt helyükhöz rögzítettek, de a SzV-pár jelenléte miatt helyfüggő elektron- és elmozdulási polarizációval rendelkeznek.



4.9. ábra. Alapállapotú SzV-pár és az ionelmozdulások számításánál használt koordináta-rendszer NaCl rácsban. Az atomisztikus számítás a számozott ionokra terjed ki (I. tartomány)

Egy az I. tartományban levő, kiszemelt (pl. N sorszámú) ion egyensúlyát az elektrosztatikus, a taszító- és a van der Waals-erő figyelembevételével számítom. A számítás ismertetése előtt bevezetek néhány jelölést. N és M az I. tartománybeli, R a II. tartománybeli, L pedig vagy az I., vagy II. tartományhoz tartozó ion sorszámát jelenti. Az N -edik ion helyvektorát $\vec{x}(N)$ -nel, a helyvektor i -edik komponensét $x_i(N)$ -nel jelölöm. Bevezetem továbbá az

$$\vec{x}_{NM} = \vec{x}(N) - \vec{x}(M)$$

$$x_{NM} = |\vec{x}_{NM}| \quad (4.19)$$

$$\Delta x_i(N, M) = x_i(N) - x_i(M)$$

jelöléseket.

Az N -edik ionra ható elektrosztatikus erő i -edik komponensét az ismert

$$F_i^e(N) = Q_N E_i(N) \quad (4.20)$$

összefüggésből kapjuk, ahol Q_N az N -edik ion elektromos töltése, $E_i(N)$ pedig az I. tartományhoz tartozó ionok töltéséből, ugyanezen ionok indukált dipólmomentumból, és a II. tartomány ionjainak elektron- és elmozdulási polarizációjából származó elektromos terek eredőjének i -edik komponense az N -edik ion mindenkor helyén. A térerősség különböző összetevői az alábbi módon kaphatók meg.

Az I. tartománybeli M -edik ion Q_M töltése által létrehozott térerősség i -edik komponense az N -edik ion helyén az

$$E_{Mi}(N) = \frac{Q_M \Delta x_i(N, M)}{4\pi\epsilon_0 x_{NM}^3} \quad (4.21)$$

Coulomb-törvényből kapható, ahol ϵ_0 a vákuum permittivitása. Az I. tartomány M -edik ionjának $\vec{p}(M)$ indukált dipólmomentumától származó térerősség i -edik komponensét az

$$E'_{Mi}(N) = \frac{3\Delta x_i(N, M)\vec{p}(M)\vec{x}_{NM} - p_i(M)x_{NM}^2}{4\pi\epsilon_0 x_{NM}^5} \quad (4.22)$$

kifejezésből kapjuk. A (4.21) és (4.22) kifejezések tartalmazzák az N és M sorszámú ionok ismeretlen $u_i(N)$ és $u_i(M)$ elmozdulás komponenseit, hiszen

$$x_i(N) = x_i^0(N) + u_i(N) \quad \text{és} \quad x_i(M) = x_i^0(M) + u_i(M), \quad (4.23)$$

ahol x_i^0 az ionok tökéletes rácsbeli helykoordinátájának i -edik komponense. Az elmozduláskomponensek mellett ismeretlenek még az I. tartomány ionjainak $\vec{p}(N)$ indukált dipólmomentumai is, mivel ezek az adott ion helyén uralkodó teljes térerősségtől (és ezen keresztül az ionok helyétől) függenek:

$$p_i(N) = \alpha_N E_i(N). \quad (4.24)$$

Itt α_N az N -edik ion elektron-polarizálhatósága.

A II. tartomány egy rácspontjában elhelyezkedő R sorszámú ion elektron- és elmozdulási polarizációjából származó térerősség a (4.22) kifejezéshez hasonló

$$E_{Ri}(N) = \frac{3\Delta x_i(N, R)\vec{p}(R)\vec{x}_{NR} - p_i(R)x_{NR}^2}{4\pi\epsilon_0 x_{NR}^5} \quad (4.25)$$

összefüggésből kapható. Itt $p_i(R)$ az R sorszámú ion teljes dipólmomentumának i -edik komponense. A $p_i(R)$ dipólmomentum-komponensek kiszámítására a folytonos dielektrikumokra vonatkozó törvények alkalmazásával Mott és Littleton (1938) vezetett le egy összefüggést, amely egy $\vec{x}(N_q)$ helyvektorú N_q rácspontban elhelyezkedő q többlettöltés által az $\vec{x}(R)$ pontban létrehozott dipólmomentumot adja meg. Eszerint az R ionon létrejött dipólmomentum i -edik komponense

$$p_i^q(R) = M_R \frac{q\Delta x_i(R, N_q)}{x_{RNq}^3}, \quad (4.26)$$

ahol

$$M_R = \frac{a_0^3}{2\pi\epsilon_0} \left(1 - \frac{1}{\epsilon_r} \right) \frac{\alpha + \alpha_R}{\alpha_+ + \alpha_- + 2\alpha}. \quad (4.27)$$

Itt α_+ , illetve α_- a kristályt alkotó pozitív, illetve negatív ion elektronpolarizálhatósága, α_R az R ion elektronpolarizálhatósága, α az elmozdulási polarizálhatóság, ϵ_r a kristály anyagának relatív permittivitása, a_0 a kation—anion távolság. SzV-pár esetén a $p_i(R)$ dipólmomentumok csak a SzV-pár közelében elhelyezkedő ionoknál számottevőek, mert a rácsot a szennyező ion (Me) pozitív, és a kation vakancia (V) negatív többlettöltése egyidejűleg polarizálja. A teljes dipólmomentum

$$p_i(R) = p_i^V(R) + p_i^{Me}(R). \quad (4.28)$$

Az N ionra ható teljes elektrosztatikus erő i -edik komponensét az

$$F_i^e(N) = Q_N \left[\sum_{M \neq N} (E_{Mi}(N) + E'_{Mi}(N)) + \sum_R E_{Ri}(N) \right] \quad (4.29)$$

kifejezés adja meg, ahol az összegzés az I. tartománybeli ionokra, illetve a II. tartomány egy részében elhelyezkedő ionokra (azaz M -re és R -re) történik.

Az N -edik ionra ható taszító erő, amelyet az I. vagy II. tartományba eső L sorszámú ion fejt ki, a *Pauling* (1960) által javasolt

$$U_L^t(N) = a_{NL} b' \exp \left\{ \frac{r_N + r_L - x_{NL}}{\varrho} \right\} \quad (4.30)$$

párpotenciálból számítható ki az

$$F_{Li}^t(N) = -\nabla_i U_L^t(N) \quad (4.31)$$

összefüggés segítségével. Itt r_N és r_L a két kölcsönható ion sugara, b' és ϱ konstansok, a_{NL} pedig a két ion elektronszerkezetétől és töltésétől függő szám, amely *Pauling* (1960) szerint

$$a_{NL} = 1 + \frac{z_N}{n_N} + \frac{z_L}{n_L} \quad (4.32)$$

(z_N és z_L az ionok vegyértéke, n_N és n_L az ionok külső elektronhéján lévő vegyérték-elektronok száma).

A van der Waals-kölcsönhatásból származó erő szintén egy párpotenciálból (*Seitz* 1940)

$$U_L^{vw}(N) = -\frac{c_{NL}}{x_{NL}^6} - \frac{d_{NL}}{x_{NL}^8} \quad (4.33)$$

kapható az

$$F_{Li}^{vw}(N) = -\nabla_i U_L^{vw}(N) \quad (4.34)$$

összefüggés segítségével. A c_{NL} és d_{NL} konstansok az ionok elektronpolarizálhatóságától (α_N és α_L) és az ionok spektrumának frekvenciahatárától (ν_N és ν_L) függenek. A Na^+ és Cl^- ionokra a fenti konstansok *Mayer* (1933) által megadott értékeit használtam, a kétvegyértékű kationokra azonban ezeket ki kellett számítani. Ez a *Seitz* (1940)-tól származó

$$c_{NL} = \frac{3h\nu_N\nu_L}{2(\nu_N + \nu_L)} \alpha_N \alpha_L \quad (4.35)$$

$$d_{NL} = c_{NL}(\nu_N \alpha_N + \nu_L \alpha_L) \frac{h}{e^2} \quad (4.36)$$

összefüggések segítségével történt (h a Planck-állandó, e az elemi töltés).

Az N -edik ionra a taszító- és van der Waals-kölcsönhatásból származó erőt az

$$F_i^t(N) + F_i^{vw}(N) = \sum_L [F_{Li}^t(N) + F_{Li}^{vw}(N)] \quad (4.37)$$

összeg adja, ahol az összegzést jelentő L index az I. tartomány ionjaira és a II. tartomány egy részére vonatkozik.

Az $u_i(N)$ elmozduláskomponensek és $p_i(N)$ dipólmomentum-komponensek meghatározása az ionokra felírt erőegyensúly-egyenletekből és az elektromos tér-erősség és indukált dipólmomentum között fennálló (4.24) összefüggésből történik. A 4.9. ábrán megszámozott 11 ion erő- és dipólmomentum-komponenseire általános

esetben az alábbi, 66 ismeretlen tartalmazó, nemlineáris egyenletrendszer írható fel:

$$F_i^e(N) + F_i^t(N) + F_i^{vw}(N) = 0$$

$$p_i(N) - \alpha_N \frac{F_i^e(N)}{Q_N} = 0 \quad (4.38)$$

$$i = 1, 2, 3$$

$$N = 1, 2, \dots, 11.$$

Az ismeretlenek (és az egyenletek) száma csökkenthető a SzV-pár szimmetriáiból következő alábbi összefüggések figyelembevételével

$$\left. \begin{aligned} u_1(N) &= u_2(N+1) \\ u_2(N) &= u_1(N+1) \\ p_1(N) &= p_2(N+1) \\ p_2(N) &= p_1(N+1) \end{aligned} \right\}, \quad \text{ha } N = 2, 4, 6 \quad (4.39a)$$

$$\left. \begin{aligned} u_1(N) &= u_1(N+1) \\ p_1(N) &= p_1(N+1) \end{aligned} \right\}, \quad \text{ha } N = 8, 10 \quad (4.39b)$$

$$\left. \begin{aligned} u_3(N) &= u_2(N) \\ p_3(N) &= p_2(N) \end{aligned} \right\}, \quad \text{ha } N = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 \quad (4.39c)$$

$$\left. \begin{aligned} u_1(N) &= 0 \\ p_1(N) &= 0 \end{aligned} \right\}, \quad \text{ha } N = 1, 8, 9, 10, 11 \quad (4.39d)$$

$$\left. \begin{aligned} u_3(N) &= -u_3(N+1) \\ p_3(N) &= -p_3(N+1) \end{aligned} \right\}, \quad \text{ha } N = 8, 10 \quad (4.39e)$$

így összesen 11—11 független elmozdulás- és dipólmomentum-komponens marad és (4.38) helyett csak az alábbi 22 ismeretlenes nemlineáris egyenletrendszert kell megoldani:

$$F_i^e(N) + F_i^t(N) + F_i^{vw}(N) = 0$$

$$p_i(N) - \alpha_N \frac{F_i^e(N)}{Q_N} = 0 \quad (4.40)$$

$$i = 1, \quad \text{ha } N = 1, 3, 5, 7, 9, 11$$

$$i = 2, \quad \text{ha } N = 3, 5, 7$$

$$i = 3, \quad \text{ha } N = 9, 11.$$

Az egyenletrendszer bonyolult volta miatt csak numerikus megoldás jöhet szóba, és a nagymennyiségű számítási munka számítógép használatát teszi szükségessé. A később ismertetendő konkrét számításoknál az egyenletrendszer megoldása a Newton-módszerrel történt.

4.212. A szennyező—vakancia-párt jellemző dilatációs tenzor

A SzV-pár átlagos dilatációs tenzora az ionelmozdulásokból úgy kapható meg, hogy a (4.17) összefüggést (σ_{ij}^D szimmetrikus voltát kihasználva) a (4.16) szempontjából ekvivalens

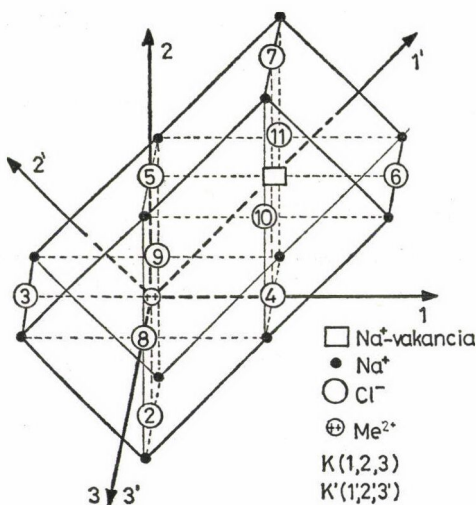
$$\bar{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{V_H} \int_A u_i dA_j \quad (4.41)$$

alakba írjuk. Itt A a V_H hibatérfogatot határoló felület, dA_j egy felületelem-vektor j -edik komponense, u_i pedig az elmozdulás i -edik komponense a felületelemen.

A számításoknál alkalmazott hibatérfogat a 4.10. ábrán látható. Az ionok számozása és a K koordinátarendszer azonos 4.9. ábra számozásával, illetve koordinátarendszerével. Ahhoz, hogy az ionelmozdulásokból a dilatációs tenzort megkapjuk, a (4.41) integrált az

$$\bar{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{V_H} \sum_{N=2}^{11} u_i(N) \Delta A_j(N) \quad (4.42)$$

közelítő összeggel helyettesítjük. Itt $u_i(N)$ az N -edik ion elmozdulásának i -edik komponense, $\Delta A_j(N)$ az N -edik ionhoz tartozó felület vektorának j -edik komponense.



4.10. ábra. A SzV-pár dilatációs tenzorának számításánál használt koordinátarendszerek és a hibatérfogat

Az elmozdulásokat a 4.10. ábra K koordinátarendszerében határozom meg, de a dilatációs tenzor számításánál célszerűbb az ábrán K' -vel jelölt főtengelyrendszer használata. Elvégezve az $u_i \rightarrow u'_i$ és a $\Delta A_j \rightarrow \Delta A'_j$ transzformációkat, és felhasználva, hogy $V_H = 8a_0^3$ a (4.42) összefüggés alapján az $\bar{\varepsilon}'_i$ fődilataciók a K -beli elmozdulá-

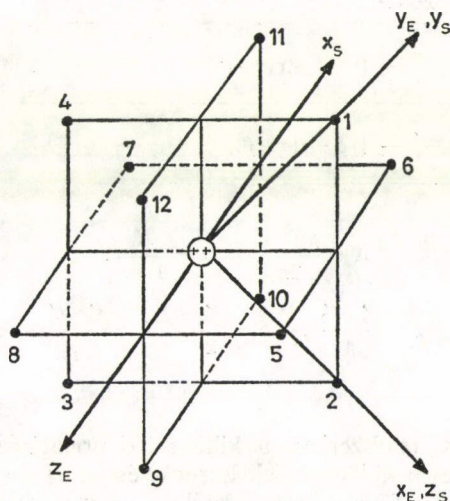
sokkal az alábbi módon fejezhetők ki:

$$\begin{aligned}\bar{\varepsilon}'_1 &= \frac{1}{4a_0} [-u_1(2) - u_1(3) + u_1(6) + u_1(7)] \\ \bar{\varepsilon}'_2 &= \frac{1}{4a_0} [u_1(2) - u_1(3) + 2u_1(4) - 2u_1(5) + u_1(6) - u_1(7)] \\ \bar{\varepsilon}'_3 &= \frac{1}{2a_0} [u_3(8) + u_3(10)].\end{aligned}\quad (4.43)$$

A (4.43) kifejezésekből látható, hogy a SzV-pár mindhárom fődilatációja különböző, vagyis a SzV-pár deformációs tere nem tetragonális szimmetriájú.

4.213. A kölcsönhatási energia számítása

Ismerve a SzV-pár átlagos dilatációs tenzorát, a diszlokáció és SzV-pár kölcsönhatási energiája a (4.18) összefüggésből számítható ki. Ennél a számolásnál azonban nem célszerű a 4.10. ábra K' rendszerét használni, hiszen ez a SzV-pár minden egyes orientációjára más és más. Ezért a kölcsönhatási energiát azokban a koordináta-rendszerekben írom fel, amelyekben a diszlokációk feszültségtenzorát általában megadják (Kovács és Zsoldos 1965). A 4.11. ábrán látható az él- és csavardiszlokáció esetén használatos $K_E(x_E, y_E, z_E)$ és $K_S(x_S, y_S, z_S)$ koordináta-rendszer. Ugyanitt feltüntettem a SzV-pár lehetséges orientációit is 1—12 számozással, rögzített szennyező



4.11. ábra. A diszlokáció és SzV-pár kölcsönhatási energiájának számításánál használt koordináta-rendszerek (K_E az éldiszlokáció, K_S a csavardiszlokáció esetén). A számok a SzV-pár lehetséges orientációit jelölik

4.I. TÁBLÁZAT

Különböző orientációjú SzV-párok és él-, illetve csavardiszlokáció kölcsönhatási energiáját megadó kifejezések ($\bar{\epsilon}'_i$ a SzV-pár fődilatációit jelöli, μ a nyírási modulus, ν a Poisson-szám, b a Burgers-vektor nagysága, V_H a hibatérfogat, x és y koordináták a K_E , illetve a K_S koordináta-rendszerben).

	(n)	$U_K^{(n)}$
Éldiszlokáció	1, 3	$D \left\{ \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \bar{\epsilon}'_1 - \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \bar{\epsilon}'_2 - \frac{2vy}{x^2 + y^2} \bar{\epsilon}'_3 \right\}$
	2, 4	$D \left\{ -\frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \bar{\epsilon}'_1 + \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \bar{\epsilon}'_2 - \frac{2vy}{x^2 + y^2} \bar{\epsilon}'_3 \right\}$
	5, 6 7, 8	$D \left\{ -\frac{2y}{x^2 + y^2} (\alpha + \beta + 2\alpha\nu) + \frac{2x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} (\alpha - \beta) \right\}$
	9, 10 11, 12	$D \left\{ -\frac{2y}{x^2 + y^2} (\alpha + \beta + 2\alpha\nu) - \frac{2x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} (\alpha - \beta) \right\}$
Csavardiszlokáció	1, 2 3, 4	0
	5, 7	$\frac{2A}{x^2 + y^2} \{-y\delta + x(\alpha - \beta)\}$
	6, 8	$\frac{2A}{x^2 + y^2} \{y\delta + x(\alpha - \beta)\}$
	9, 11	$\frac{2A}{x^2 + y^2} \{-y\delta - x(\alpha - \beta)\}$
	10, 12	$\frac{2A}{x^2 + y^2} \{y\delta - x(\alpha - \beta)\}$

Jelölések:

$$A = \frac{\mu b V_H}{2\pi}, \quad D = \frac{A}{1 - \nu},$$

$$\alpha = \frac{\bar{\epsilon}'_1 + \bar{\epsilon}'_2}{4}, \quad \beta = \frac{\bar{\epsilon}'_3}{2}, \quad \delta = \frac{\bar{\epsilon}'_2 - \bar{\epsilon}'_1}{2\sqrt{2}}$$

ion esetén. A K_E és K_S rendszerben a különböző orientációjú SzV-párok dilatációs tenzorai természetesen különbözőek lesznek, és az új $\bar{\epsilon}_{ij}^{(n)}$ tenzorkomponensek az egyes SzV-párok saját főtengetrendszerében meghatározott $\bar{\epsilon}'_{ij}$ komponensek transzformálásával kaphatók meg (az (n) index a SzV-pár orientációját jelöli). A transzformált tenzorkomponensekkel a diszlokáció és egy (n) orientációjú SzV-pár kölcsönhatási energiája

$$U_K^{(n)} = -V_H \sum_{i,j} \bar{\epsilon}_{ij}^{(n)} \sigma_{ij}^p(\vec{x}_p), \quad (4.44)$$

ahol \vec{x}_p a SzV-pár centrumának helyvektora. A (4.44) összefüggésbe behelyettesítve a SzV-pár dilatációs tenzorának transzformált alakját és a diszlokáció feszültségtenzorának ismert kifejezéseit, megkapjuk a különböző orientációjú SzV-párok és az él-, illetve csavardiszlokáció kölcsönhatási energiáját megadó összefüggéseket, amelyeket a 4.I. táblázatban foglaltam össze.

4.22. Rögzített szennyező—vakancia-párok kritikus csúsztatófeszültség-járuléka

A KCsF Fleischer-járulékának számításához a diszlokáció és SzV-pár között fellépő erőhatás maximális értéke szükséges (2.2. pont). A diszlokációra ható erőnek a mozgásiránnyal (x tengely) párhuzamos összetevője egy (n) orientációjú SzV-párral történő kölcsönhatás esetén az

$$f^{(n)}(x, y) = \frac{\partial U_K^{(n)}(x, y)}{\partial x} \quad (4.45)$$

összefüggésből számítható ki, ahol y a SzV-pár centrumának távolsága a csúszási síktól. Ennek az erőnek az $f_m^{(n)}(y)$ maximális értéke pedig a

$$\frac{\partial f^{(n)}(x, y)}{\partial x} = 0 \quad (4.46)$$

egyenletből kapható x_m értéknek a (4.45) egyenletbe történő behelyettesítésével számítható ki

$$f_m^{(n)}(y) = f^{(n)}(x_m, y). \quad (4.47)$$

Mivel a diszlokációtól különböző távolságban levő és különböző orientációjú SzV-párok a diszlokáció számára különböző fékező centrumot jelentenek, a 0 K -en érvényes KCsF-járulék számításánál a (2.7) összegzési szabályt alkalmazom. Orientáció szerint egyenletes eloszlású SzV-párok esetén $c_f^{(n)} = c_f/12$ (c_f az SzV-párok felületi koncentrációja), ezért a (2.7) összefüggés a

$$\tau_F^0 = \frac{c_f^{1/2}}{2b \sqrt{12T_L}} \frac{\sum_{n,j} [f_m^{(n)}(y_j)]^2}{[\sum_{n,j} f_m^{(n)}(y_j)]^{1/2}} \quad (4.48)$$

alakot ölti. Itt y_j a SzV-pár centrumának a csúszási síktól mért lehetséges távolságait jelöli, az $f_m^{(n)}(y_j)$ mennyiségek a (4.45)–(4.47) egyenletekből kapható maximális erőértékek, T_L a diszlokáció vonalmenti feszültsége, amely az alábbi kifejezéssel adható meg

$$T_L = \gamma \mu b^2 \quad (4.49)$$

(γ a diszlokáció típusától függő állandó). A c_f felületi koncentráció a SzV-párok c_p atomi koncentrációjából a

$$c_f = \frac{c_p b}{2\Omega} \quad (4.50)$$

összefüggéssel számítható ki (Ω az egy kationhelyre jutó térfogat).

Magasabb hőmérsékleten, ahol a diszlokációk mozgását a termikus aktiváció is

segíti, a KCsF-járulék számítására a (2.14) empirikus összefüggést használom, amely szerint a τ_F Fleischer-járulékra T hőmérsékleten

$$\left(\frac{\tau_F}{\tau_F^0}\right)^{1/2} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{1/2}. \quad (4.51)$$

Itt T_c az a hőmérséklet, ahol a Fleischer-járulék eltűnik, τ_F^0 pedig a Fleischer-járulék 0 K-en, amit a (4.48) összefüggés ad meg.

4.23. Forgásképes szennyező—vakancia-párok kritikus csúsztatófeszültség-járuléka

A hőmérséklet emelkedésével forgékonnyá váló SzV-pároknak a Snoek-effektusból eredő KCsF-járulékát a 2.3. pontban ismertetett szimulációs módszerrel határozom meg. A számításhoz ismerni kell a SzV-pár és a diszlokáció kölcsönhatási energiáját, amelynek meghatározása a 4.21. pontban ismertetett módszerrel történik. A SzV-pár szennyező ionját helyhez kötöttnek tételezem fel, mivel az általam vizsgált esetekben a szennyező diffúziója nem játszik jelentős szerepet.

A szimuláció során egy v sebességű diszlokáció a csúszási síkban egy $(-x_0, +x_0)$ távolságon fut végig (a SzV-pár az $x=0$ síkon helyezkedik el). A szimulációs eljárással meghatározható, hogy eközben mennyi energiát disszipál a különböző állapotok közötti átmenetek során a csúszási síktól y_k távolságban levő SzV-pár. Az eljárást adott kezdeti orientációval N_0 -szor ismételve, majd ugyanezt a lehetséges 12 kezdőállapottal végrehajtva 12 N_0 számú diszlokáció-futásból kiszámítjuk a csúszási síktól y_k távolságban lévő SzV-pár által disszipált energia átlagos értékét. Ezt $\overline{\Delta E}(y_k)$ -val jelölve, a KCsF Snoek-járuléka a 2.3. pontban ismertetett

$$\tau_s = \frac{c_p}{Ab} \sum_{k=-M_0}^{M_0} \overline{\Delta E}(y_k) \quad (4.52)$$

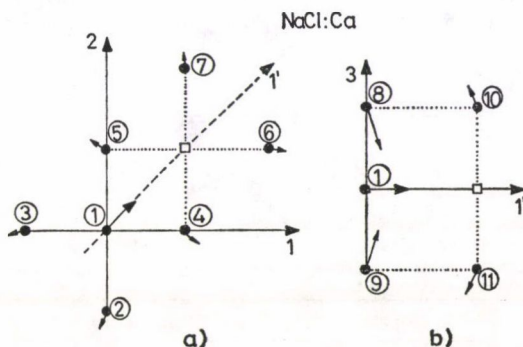
összefüggésből számítható ki. Itt A az egy kationra jutó terület a csúszási síkban, az összegzés a lehetséges $y_k = k \frac{b}{2}$ értékekre történik, a figyelembe vett síkok számát M_0 értéke szabja meg.

4.24. A számítási módszer alkalmazásai

A 4.21.—4.23. pontokban ismertetett számítási módszert különböző kétvegyértékű kation szennyezőt tartalmazó NaCl kristályokra alkalmaztam. Először meghatároztam az ionelmozdulásokat a SzV-párok körül, majd kiszámítottam a SzV-párokat jellemző átlagos dilatációs tenzorokat. Ezek felhasználásával a különböző szennyezőkre 0 K-en meghatároztam a KCsF Fleischer-járulékát. Kiszámítottam a Ca^{2+} ion—kation vakancia-pár által okozott KCsF-járulék hőmérsékletfüggését az Appel (1974) kísérleteinek megfelelő paraméterekkel. A számított KCsF tartalmazza mind a Fleischer-, mind pedig a Snoek-járulékot. Végül a Snoek-járulék-nak a szennyező típusától való függését határoztam meg a saját kísérleteimnek (4.12. pont) megfelelő paraméterekkel. A számítási eredményeket összevetettem a kísérleti adatokkal.

4.241. Különböző szennyezőt tartalmazó szennyező—vakancia-párok dilatációs tenzorai

A dilatációs tenzorok meghatározásához először kiszámítottam a SzV-pár körüli ionelmozdulásokat Mg, Ca, Sr és Ba szennyezők esetén a 4.211. pontban ismertetett módon. A taszító kölcsönhatás számításánál a $\varrho = 0,0345$ nm és $b' = 2,29 \cdot 10^{-20}$ J átlagolt (Lidiard 1957) paraméterértékeket és a Goldschmidt-féle ionsugarakat (l. pl. Winkler 1955) használtam. A van der Waals-kölcsönhatás c_{ij} és d_{ij} paramétereit Na^+ és Cl^- ionok egymás közötti kölcsönhatásánál Mayer (1933) munkájából vettem át, a kétegyértékű kation szennyezők esetén pedig a (4.35)—(4.36) összefüggésekből számítottam ki a Boswarva (1970) által megadott α és ν értékekkel.



4.12. ábra. Ca^{2+} —vakancia-pár környezetében létrejött ionelmozdulások az 1—2 síkban (a) és az 1'—3 síkban (b). Az ionok számozása azonos a 4.10. ábra számozásával

A (4.38) egyenletrendszer megoldása útján kapott eredmények illusztrálására a 4.II. táblázatban bemutatom a számított ionelmozdulásokat és az ionok indukált dipólmomentumát Ca szennyező esetén. Az $u_i(N)$ elmozdulás- és a $p_i(N)$ dipólmomentum-komponenseket értelmező koordinátarendszerek és az ionok számozása a 4.10. ábrán látható. A jobb áttekinthetőség kedvéért a 4.12. ábrán az ionelmozdulások sémáját is megadom. A szennyező ion a várakozásnak megfelelően a vakancia felé mozdul el, a többi ion elmozdulása pedig ezzel összhangban van. Hasonló jellegű ionelmozdulások adódnak a többi szennyező esetén is, csupán az elmozdulások nagysága különböző.

Az elmozdulásokból a (4.43) összefüggések segítségével kiszámított átlagos fődilatációkat különböző kétegyértékű kation szennyezők esetén a 4.III. táblázatban tüntettem fel. Sajnos a fődilatációkra kísérleti adatok nincsenek. Nagyságrendi ellenőrzésre azonban az irodalomban illesztéssel meghatározott $\Delta\epsilon = \epsilon_{22} - \epsilon_{33}$ „tetragonális” is felhasználható, amelynek értékei 0,1 és 0,6 között változnak (2.2. pont). Ugyanerre a mennyiségre a 4.III. táblázat alapján a különböző szennyezőkre 0,13 és 0,35 közötti értékek adódnak. A számított fődilatációk tehát nagyságrendileg helyesek, ami azt mutatja, hogy az alkalmazott számítási módszer használható. A fődilatációkra kapott számszerű értékek alátámasztják azt a (4.43) összefüggésekből levont következtetést, hogy a SzV-pár nem tetragonális hiba.

4.II. TÁBLÁZAT

Ca^{2+} ion—kation vakancia-pár körüli ionok elmozdulás- és indukált dipólmomentum-komponensei. A jelölések a 4.10. ábrán láthatók (a_0 a kation—anion távolság, e az elemi töltés)

Elmozdulás-komponensek (a_0 egységben)	Dipólmomentum-komponensek (ea_0 egységben)
$u'_1(1) +0,171$	$p'_1(1) -0,001$
$u_1(2) -0,019$	$p_1(2) +0,008$
$u_2(2) -0,057$	$p_2(2) +0,031$
$u_1(4) +0,019$	$p_1(4) +0,071$
$u_2(4) -0,061$	$p_2(4) +0,044$
$u_1(6) +0,061$	$p_1(6) -0,065$
$u_2(6) -0,008$	$p_2(6) +0,005$
$u'_1(8) +0,065$	$p'_1(8) -0,078$
$u_3(8) -0,275$	$p_3(8) +0,238$
$u'_1(10) -0,052$	$p'_1(10) +0,032$
$u_3(10) +0,099$	$p_3(10) -0,082$

4.III. TÁBLÁZAT

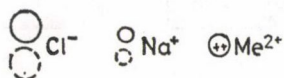
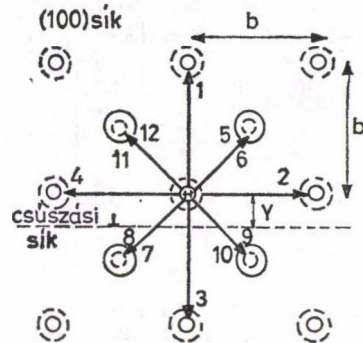
Különböző kétegyértékű kation szennyezőből létrejött SzV-párok számított fődilatációi. A főtengely-rendszer a 4.10. ábra K' rendszere, a fődilatációk számítása a (4.43) összefüggésekből történt

Fődilatáció	Szennyező ion			
	Mg^{2+}	Ca^{2+}	Sr^{2+}	Ba^{2+}
$\bar{\epsilon}'_1$	0,034	0,032	0,031	0,028
$\bar{\epsilon}'_2$	0,041	0,066	0,229	0,192
$\bar{\epsilon}'_3$	-0,092	-0,088	-0,118	-0,101

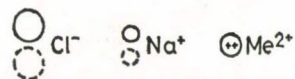
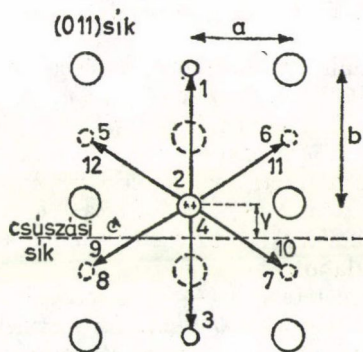
4.242. Szennyező—vakancia-párok kritikus csúsztatófeszültség-jároléka 0 K-en

A KCsF Fleischer-járolékának számításához mindenekelőtt a diszlokációra ható erő maximális értékének ismerete szükséges. A maximális erőértékek ($f_m^{(n)}(y)$) meghatározása a (4.45)—(4.47) egyenletek segítségével történt. A csúszási síkhoz túl közeli vagy a diszlokáció által átmetszett SzV-párok esetében azonban a kontinuum közelítésben fellépő ismert (2.2. pont) problémák miatt az erő-maximum meghatározása külön megfontolást kíván. Ezt a problémát az irodalomban rendszerint úgy oldják meg, hogy feltételeznek egy r_0 minimális távolságot, amelyen belül a kontinuum elmélet nem érvényes. A diszlokációtól $r < r_0$ távolságra levő ponthiba által kifejtett erőt helyettesítik azzal az erővel, amelyet az r_0 távolságra levő hiba fejt ki. Az r_0 távolság lényegében egy illesztési paraméter, amely csak a diszlokáció—ponthibakölcsönhatás teljesen atomisztikus tárgyalásával küszöbölhető ki (ott viszont másfajta nehézségek lépnek fel; 2.2. pont). Mivel számításaim során a kontinuum elmélet keretein belül maradtam, a fenti probléma megoldásában az irodalomban elfogadott eljárást követtem. A minimális távolságot $r_0 = b/2$ -nek választottam, és azokban az

esetekben, amikor a SzV-pár centruma ennél közelebb esik a csúszási síkhoz, a SzV-párhoz tartozó $f_m^{(n)}$ értéket a vele párhuzamos, legközelebbi, de legalább $b/2$ távolságra lévő SzV-pár $f_m^{(n)}$ értékével helyettesítettem. A 4.13. ábrán láthatók a csúszási síkhoz legközelebb eső szennyező ion ($Y=b/4$) esetén a lehetséges SzV-pár-orientációk.



a)



b)

4.13. ábra. SzV-pár lehetséges orientációi egy éldiszlókációra (a), illetve csavardiszlókációra (b) merőleges síkra vetítve, a csúszási síkhoz a lehető legközelebb eső szennyező ion esetén. A szaggatott körök a rajz síkja előtt vagy mögött levő ionokat jelölnék (vagyis az 5–12 SzV-párok nincsenek a rajz síkjában)

4.IV. TÁBLÁZAT

Ca^{2+} ion—kation vakancia-pár által a diszlokációra kifejtett erő maximális értékei (n a SzV-pár 4.13. ábra szerinti orientációja, Y a szennyező ion távolsága a csúszási síktól)

	Y	$f_m^{(n)} (10^{-10} \text{ N})$											
		$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$	$n = 5$	$n = 6$	$n = 7$	$n = 8$	$n = 9$	$n = 10$	$n = 11$	$n = 12$
Csavar-diszlokáció	+b/4	0	0	0	0	1,6	1,6	1,6	1,6	9,5	9,5	9,5	9,5
	-b/4	0	0	0	0	1,6	1,6	1,6	1,6	9,5	9,5	9,5	9,5
	+3b/4	0	0	0	0	0,4	0,4	1,6	1,6	9,5	9,5	2,4	2,4
	-3b/4	0	0	0	0	1,6	1,6	0,4	0,4	2,4	2,4	9,5	9,5
	+5b/4	0	0	0	0	0,2	0,2	0,4	0,4	2,4	2,4	1,1	1,1
	-5b/4	0	0	0	0	0,4	0,4	0,2	0,2	1,1	1,1	2,4	2,4
Éldiszlokáció	+b/4	1,1	2,5	1,1	2,5	12,6	12,6	12,6	12,6	7,7	7,7	7,7	7,7
	-b/4	1,1	2,5	1,1	2,5	12,6	12,6	12,6	12,6	7,7	7,7	7,7	7,7
	+3b/4	0,4	2,5	1,1	2,5	3,1	3,1	12,6	12,6	7,7	7,7	1,9	1,9
	-3b/4	1,1	2,5	0,4	2,5	12,6	12,6	3,1	3,1	1,9	1,9	7,7	7,7
	+5b/4	0,2	0,9	1,1	0,9	1,4	1,4	3,1	3,1	1,9	1,9	0,9	0,9
	-5b/4	1,1	0,9	0,2	0,9	3,1	3,1	1,4	1,4	0,9	0,9	1,9	1,9

Ezek közül a fenti helyettesítést alkalmaztam az alábbi esetekben: csavardiszlokációnál az $n=7, 8, 9, 10$ ($n=2$ és 4-nél az erő nulla), éldiszlokációnál pedig az $n=2, 4, 7, 8, 9, 10$ orientációkra.

A számításnál használt paraméterek értékei az alábbiak voltak. $\mu_0 = (c_{11} - c_{12})/2 = 2,38 \cdot 10^{10}$ Pa (Overton és Swim 1951), $\gamma = 0,5$ csavardiszlokáció és $\gamma = 0,36$ éldiszlokáció esetén (Mitchell és Heuer 1977), $b = 0,398$ nm (NaCl rács). Példaként a 4.IV. táblázatban megadom a Ca^{2+} ion—kation vakancia-pár esetén kapott $f_m^{(n)}(y)$ értékeket, ahol a fenti helyettesítéseket már elvégeztem. Hasonló számításokat végeztem Mg^{2+} , Sr^{2+} és Ba^{2+} iont tartalmazó SzV-párokra, de az erő-maximum értékeket ezekben az esetekben nem adom meg, csak a belőlük kapott KCsF-értékeket (l. alább).

Az $f_m^{(n)}(y_i)$ értékek ismeretében a (4.48) összefüggés segítségével kiszámítottam a rögzített SzV-párok KCsF-járulékát 0 K-en. Ez a járulék a SzV-párok koncentrációjának (c_p) 1/2-ik hatványával arányos, ezért jellemzésére az

$$SH = \frac{\tau_F^0}{c_p^{1/2}} \quad (4.53)$$

ún. specifikus keményedés értékeit adtam meg a 4.V. táblázatban. Ugyanitt feltüntettem néhány kísérletileg meghatározott értéket is (SH_{kis}), amelyeket alacsony hőmérsékleti mérések 0 K-re történő extrapolációjával kaptak. A kísérleti adatokkal kapcsolatban lényeges megjegyezni, hogy egyedül Appel (1974) adatai származnak az effektív feszültség méréseiből, a többi esetben az effektív feszültséget a teljes KCsF-értékből becsléssel állapították meg.

A kísérleti- és elméleti SH -értékek összehasonlításából megállapítható, hogy az elmélet az $r_0 = b/2$ választással a csavardiszlokáció—SzV-pár kölcsönhatást Ca és Sr szennyező esetén jól visszaadja (Sr szennyezőnél az egyezés bizonyító ereje kisebb,

4-V. TÁBLÁZAT

Számított (SH_{elm}) és mért (SH_{kls}) specifikus keményedéértékek különböző kétvegyértékű kationt tartalmazó SzV-párok esetén 0 K-en

	Szennyező ion			
	Mg ²⁺	Ca ²⁺	Sr ²⁺	Ba ²⁺
SH_{elm}^{csav} (MPa)	1400	1600	4300	3400
$SH_{elm}^{él}$ (MPa)	3600	3600	9800	7600
SH_{kls} (MPa)		1800 ¹ 1600 ² 2300 ³	3900 ⁴	

1—mért effektív feszültség értékekből (Appel 1974)

2—Skrotzki és munkatársai (1978) extrapolációja Hesse (1967) adataiból

3—Frank (1968) extrapolációja Hesse (1967) adataiból

4—Skrotzki és Haasen (1981) adataiból extrapolált érték (saját extrapolációjuknál hibás belső feszültség értékkel számoltak, és 1500 MPa-t kaptak)

a kísérleti adat bizonytalansága miatt). A többi szennyezőre kísérleti eredmények nem ismeretesek. Az éldiszlokációra kapott SH -értékek túl nagyok, ami azt mutatja, hogy az $r_0 = b/2$ választás itt nem megfelelő.

Az irodalomban nincs egyértelmű kísérleti tapasztalat arra vonatkozóan, hogy a KCsF-et az él- vagy csavardiszlokációk mozgása szabja meg (2.2. pont). Emiatt nincs semmiféle támpont, hogy a számításokat milyen diszlokáció feltételezésével kell elvégezni. Az itt következő esetekben a számítást csavardiszlokációra végeztem el, aminek indoka az, hogy csavardiszlokációra a rács szerkezetéből adódó $r_0 = b/2$ választás a kísérleti SH -értékekkel jól egyező eredményt ad, míg éldiszlokációnál az illesztés komplikáltabb lenne.

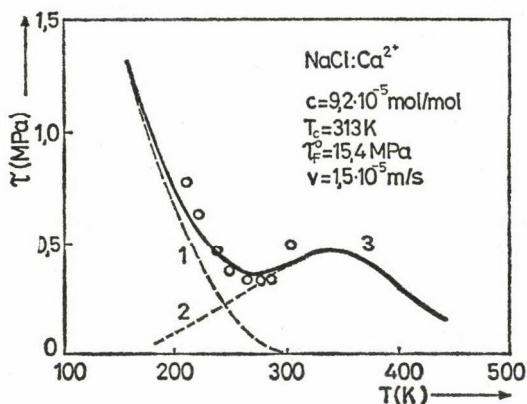
4.243. Szennyező—vakancia-párok kritikus csúsztatófeszültség-járulékának hőmérsékletfüggése

A 4.21.—4.23. pontokban ismertett számítási eljárás fontos alkalmazása a KCsF-járulék hőmérsékletfüggésének számítása széles hőmérséklet-tartományban. Ehhez mind a Fleischer-járulék, mind pedig a Snoek-járulék hőmérsékletfüggését meg kell határozni. A Fleischer-járulék számítása az előző pontban kiszámított τ_F^0 érték és a kísérletileg meghatározott T_c érték felhasználásával a (4.51) összefüggéssel történt. A Snoek-járulék hőmérsékletfüggését a 2.3. és 4.23. pontban leírt szimulációs módszerrel határoztam meg.

A számítást olyan adatokkal hajtottam végre, amelyek valóban elvégzett kísérletből származnak. Erre a célra Appel (1974, 1980) adatai a legalkalmasabbak, aki megmérte az effektív feszültség hőmérsékletfüggését 200 K és szobahőmérséklet között NaCl:Ca kristályokban. A kísérletből vett adatok az alábbiak voltak. A szennyezéskonzentráció $c = 9,2 \cdot 10^{-5}$ mol/mol, nyírási sebesség $\dot{\gamma} = 4,2 \cdot 10^{-4} s^{-1}$, a diszlokációsűrűség $\rho = 7,1 \cdot 10^{10} m^{-2}$, $T_c = 313$ K. A Snoek-járulék számításához a

diszlokációsebesség $v = \dot{\gamma}/(b\rho) = 1,5 \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$, a SzV-pár állapotváltozásait jellemző ugrási frekvencia konstansa $\nu_0 = 4,92 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$ (Fuller 1972), az aktivációs entropia $S_r/k = 1,75$ (Fuller 1972), az aktivációs entalpia $H_r = 0,70 \text{ eV}$ (Dreyfus 1961). A SzV-párok c_p koncentrációját a különböző hőmérsékleteken a c szennyezésközpont koncentrációból számítottam ki az egyszerű asszociációs elmélet segítségével (pl. Lidiard 1957) $H_a = 0,31 \text{ eV}$ asszociációs entalpiát (Fuller 1972) használva. A szimuláció adatai $x_0 = 10b$, $M_0 = 10$, $N_0 = 50$ voltak, vagyis adott γ_j esetén az átlagolás 600 futásból történt.

Az eredmények a 4.14. ábrán láthatók. A szaggatott vonal a KCsF két járulékanak számított hőmérsékletfüggését, a folytonos vonal pedig a két járulék összegét mutatja. A körök Appel (1974) mérési eredményei. Mint látható, a számított összeggörbe nagyon jól egyezik a mérési pontokkal. Kár, hogy a mért hőmérséklettartomány viszonylag rövid, és így nincs lehetőség a számítási eredmények szélesebb hőmérséklet-intervallumban történő ellenőrzésére.

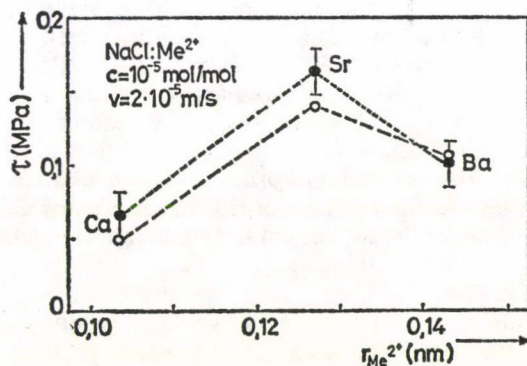


4.14. ábra. SzV-párok KCsF-járulékanak hőmérsékletfüggése Ca-mal szennyezett NaCl kristályban. 1 — számított Fleischer-járulék, 2 — számított Snoek-járulék, 3 — számított teljes KCsF-járulék; a körök (○) Appel (1974) mérési adatait mutatják

Bár a számított és mért eredmények egyezése alátámasztja az alkalmazott számítási módszer helyességét, a számítás bizonyos részeit illetően maradtak tisztázásra váró kérdések. További elméleti vizsgálatokat igényel a Fleischer- és Snoek-járulék összegzésének problémája; nem világos ugyanis, hogy az egyszerű szuperpozíció miért ad jó eredményt. Nem elvi, hanem inkább gyakorlati jellegű problémák (pl. a számítások mennyiségének megnövekedése) megoldását kívánja a különféle ponthibák (vakanciák, szennyező ionok, SzV-párok) diffúziója következtében fellépő fékező erő figyelembevétele. Ez az effektus magasabb hőmérsékleten jelentős szerepet játszhat (számítására példa a 3.224. pontban található, de szimulációs módszerrel is meghatározható).

4.244. Szennyező—vakancia-párok Snoek-járulékának függése a szennyező típusától

A számítási módszer másik alkalmazásaként saját méréseim (4.1. pont) adataival végeztem számításokat Ca, Sr, illetve Ba szennyezőt tartalmazó NaCl kristályok esetén. Az említett kísérletekben meghatároztam az effektív feszültségnek a szennyező típusától való függését szobahőmérsékleten. Mivel ekkor a feltevések szerint (2.3. pont) már a Snoek-járulék dominál, számításaimban csak ezt vettem figyelembe. A kísérletekből származó $\rho = 4 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-2}$ átlagos diszlokációsűrűségből és a $\dot{\gamma} = 3,2 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ értékből az átlagos diszlokációsebesség $v = 2 \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$, a SzV-párok koncentrációja $c_p = 10^{-5} \text{ mol/mol}$, a hőmérséklet $T = 298 \text{ K}$. Egyéb adatok $v_0 = 4,92 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$, $S_r/k = 1,75$ (mindkét adat forrása: Fuller 1972), a reorientációs aktivációs entalpiái (Dreyfus 1961) $H_r^{\text{Ca}} = 0,70 \text{ eV}$, $H_r^{\text{Sr}} = 0,70 \text{ eV}$, $H_r^{\text{Ba}} = 0,71 \text{ eV}$. A szimuláció adatai megegyeznek az előző számítás (4.244. pont) adataival.



4.15. ábra. SzV-párok Snoek-járulékának függése a szennyező ionsugarától. ○ — számított értékek, ● — mérési eredmények

A számítás eredményei (üres körök) és a 4.12. pontból származó kísérleti adatok (sötét körök) a 4.15. ábrán láthatók, ahol a KCsF-járulékot a szennyező ionsugarának függvényében ábrázoltam. Az egyezés jó, ami egyrészt alátámasztja a számítási módszer helyességét, másrészt azt a feltevést, hogy a SzV-párok KCsF-járuléka szobahőmérsékleten döntően a Snoek-effektusból származik. Mivel a számításnál a különböző szennyezők között az egyedüli eltérés a SzV-pár dilatációs tenzorának komponenseiben van, ezek pedig az ionelmozdulásoktól függenek, a szennyező méretétől való sajátos függés is az ionelmozdulások jellegével van összefüggésben. A Sr szennyező anomális hatása azzal magyarázható, hogy az ionelmozdulások nem egyszerűen az ion méretétől függenek, hanem az alaprácsal való összes kölcsönhatásainak jellegétől. Az elméleti és kísérleti eredmények egyezése közvetve azt is igazolja, hogy a SzV-párok dilatációs tenzorának meghatározására kidolgozott módszer helytálló, hiszen a kapott dilatációs tenzorok a SzV-párnak a diszlokációval való kölcsönhatása szempontjából lényeges sajátosságait magukban foglalják.

ÖSSZEFOGLALÁS

Az értekezésben mozgó diszlokációk és ponthibák kölcsönhatásának kísérleti és elméleti vizsgálatával foglalkoztam. Modellanyagként alkáli halogenid kristályokat választottam, és a diszlokáció—ponthiba-kölcsönhatást közvetett úton, e kölcsönhatáson alapuló három jelenség felhasználásával tanulmányoztam. A Sztjepanov-effektus és a Gyulai—Hartly-effektus a diszlokációk és kation vakanciák kölcsönhatásának tanulmányozását teszi lehetővé, a kétvegyértékű kation szennyezők által okozott kritikus csúsztatófeszültség-növekedés pedig a diszlokációk és szennyező—vakancia-párok kölcsönhatására vonatkozóan szolgáltat új információkat.

Az alábbiakban összefoglalom a vizsgált jelenségekkel kapcsolatos legfontosabb eredményeimet:

1. Korrigáltam a diszlokációk által szállított töltés mérésére az irodalomban hibásan alkalmazott pontbenyomat-módszert. Kidolgoztam a mérés fenomenologikus elméletét, és ennek alapján a módszert sokoldalúan ellenőriztem (Tóth és Kiss 1973).

2. A fenti módszerrel kimutattam, hogy NaCl kristályban szobahőmérsékleten a diszlokációk által szállított töltés és a kristályban levő kation vakanciák koncentrációja között egyértelmű összefüggés van, és ezzel kísérletileg alátámasztottam azt a feltevést, hogy a diszlokációtöltés kialakulása vakanciák felszedése útján végbe-mehet. Ezzel kapcsolatban az alábbi vizsgálatokat végeztem el:

a) Sr szennyezést tartalmazó NaCl kristályban megvizsgáltam a szennyezés hőkezelés hatására bekövetkező állapotváltozásai és a diszlokációk által szállított töltés közötti összefüggést (Tóth és Sárközi 1975a). A szennyező állapotváltozásait egyszerű kinetikai modellel követve kiszámítottam a kation vakanciák koncentrációjának változását, és megállapítottam, hogy a diszlokációtöltés a kation vakanciák koncentrációjával arányosan nő.

b) A diszlokációk által szállított töltés és a kristályban levő kation vakanciák koncentrációjának párhuzamos mérésével kimutattam, hogy NaCl kristályban a diszlokációtöltés a kation vakanciák koncentrációjával arányosan nő. (Tóth és Sárközi 1975b, 1976). Ez az eredmény megerősíti az a) pontban ismertetett közvetett vizsgálat helyességét is. A véletlen egybeesés kizárása érdekében a közvetlen vizsgálat során a kation vakanciák koncentrációját különböző módszerekkel változtattam; a kapott összefüggés a változtatás módjától függetlennek bizonyult.

3. Új eljárást dolgoztam ki a Gyulai—Hartly-effektus mérésére, amely az effektusnak a kristály kúszási deformációja közben történő vizsgálatán alapul. Ezzel a módszerrel igazoltam az effektus magyarázatára kidolgozott Whitworth-féle elmélet helyességét, és így kísérletileg alátámasztottam azt a feltevést, hogy az effektus létrehozásában döntő szerepe van az elektromos térben elmozduló töltött diszlokációknak (Tóth és Sárközi 1979).

4. A mozgó diszlokációk által okozott töltéstranszport magyarázatára kidolgoztam egy modellt, amely azon a feltevésen alapul, hogy a kation vakanciák a diszlokáció rugalmas- és elektromos terének hatására diffúziós mozgással követik a diszlokációt. A modell alapján kidolgoztam egy számítógépes számítási módszert, amellyel a diszlokáció által szállított töltés különböző paraméterek (diszlokációsebeség, hőmérséklet, a kation vakanciák-, illetve a kétvegyértékű kation szennyezők koncentrációja) függvényében vizsgálható. A modellel végzett számítások eredményeit a kísérleti adatokkal összevetve megállapítottam, hogy a diffúziós modell alkalmas a legfontosabb kísérleti eredmények értelmezésére, tehát a feltételezett diffúziós mecha-

nizmus a diszlokációk által okozott töltéstranszportban fontos — bizonyos körülmények között meghatározó — szerepet játszhat (Tóth és munkatársai 1980, 1984a). Ezt az állítást az alábbi vizsgálatok támasztják alá:

a) Kiszámítottam a diszlokációk által szállított töltésnek a diszlokációk sebességétől való függését Mg szennyezést tartalmazó LiF kristályokban különböző hőmérsékleteken. Az eredményeket összevettem Alsic és munkatársai kísérleti eredményeivel. Az összehasonlítás azt mutatja, hogy a diffúziós modell helyesen adja vissza a sebességfüggés jellegét, és az alacsony diszlokációsebességnél kialakuló telítési töltéstartékot is. A nagy diszlokációsebességnél beálló sebességfüggetlen kis töltéstarték a diffúziós modellel nem értelmezhető: itt más töltésszállítási mechanizmus működik.

b) Kiszámítottam a diszlokációtöltésnek a kation vakanciák koncentrációjától való függését NaCl kristályban szobahőmérsékleten. Az eredmények — saját kísérleti eredményeimmel összhangban — azt mutatják, hogy a diszlokációtöltés a kation vakanciák koncentrációjával lineárisan nő.

c) A diszlokáció által szállított töltésre kapott kísérleti és elméleti eredmények összevetéséből megbecsültem az éldiszlokáció és kation vakancia kötési energiáját, amelyre 0,6 eV értéket kaptam. A kötési energiára az irodalomban csak elméleti érték ismeretes (NaCl-re $0,4 \pm 0,2$ eV), ezzel az általam kapott érték a hibahatáron belül egyezik.

5. A diffúziós modellel meghatároztam a mozgó diszlokáció körül kialakuló vakanciakoncentráció-eloszlást és ebből különböző hőmérsékleteken kiszámítottam a töltésszállítás miatt a diszlokációra ható fékező erőt Mg-mal szennyezett LiF kristályban. Megállapítottam, hogy a fékező erőnek a diszlokációsebesség függvényében maximuma van, és a maximális érték a vizsgált 293—423 K tartományban a hőmérséklettel nő. A maximális fékező feszültség a hőmérséklettől függően a kritikus csúsztató feszültségnek 3—15%-a lehet (Tóth és munkatársai 1984a).

6. A korábbi hasonló számításokat több vonatkozásban továbbfejlesztve, kiszámítottam a szennyező—vakancia-párok kritikus csúsztatófeszültség-járulékát 0 K-en Mg, Ca, Sr és Ba szennyezők esetén NaCl kristályban. A számított értékek Ca és Sr esetén jól egyeznek a kísérleti adatokkal, a többi szennyezőre nincs kísérleti eredmény (Tóth és munkatársai 1982, Kálmán és munkatársai 1982). A számításban alkalmazott új elemek a következők:

a) Kidolgoztam egy — az ionelmozdulások atomisztikus számításán alapuló — módszert a szennyező—vakancia-párok rácsorzító hatását jellemző átlagos dilatációs tenzor meghatározására. Kiszámítottam az átlagos dilatációs tenzort Mg, Ca, Sr és Ba szennyezők esetén NaCl rácsban, és ezzel a számításból kiküszöböltem az illesztési paraméter szerepét játszó „tetragonális”-t. Kimutattam, hogy a szennyező—vakancia-pár nem tekinthető tetragonális hibának.

b) Az irodalomban szokásos „átlagos” szennyező—vakancia-pár bevezetése helyett a különböző orientációjú és a csúszási síktól különböző távolságban levő szennyező—vakancia-párokat különböző fékező centrumként kezeltem, és együttes hatásukat a szilárdoldatos keményedés Labusch-féle elmélete alapján számítottam.

7. Számítási eljárást dolgoztam ki a szennyező—vakancia-pároktól származó kritikus csúsztatófeszültség-járulék hőmérsékletfüggésének számítására, amelyben a rögzített és forgásképes szennyező—vakancia-pároktól származó részt egyaránt figyelembe vettem. Ezzel az eljárással széles hőmérséklet-tartományra kiszámítottam a szennyező—vakancia-párok kritikus csúsztatófeszültség-járulékának hőmérséklet-

függését Ca szennyezött tartalmazó NaCl kristályban. A számított eredmények jól egyeznek Appel kísérleti eredményeivel (Tóth és munkatársai 1984b). A számítás az irodalomban szokásos eljárástól az alábbiakban tér el:

a) A Fleischer-járlék számításához az általam elméleti úton kapott, 0 K-re érvényes kritikus csúsztatófeszültség-értéket használtam fel.

b) A Snoek-járlék számításához egy a korábbi módszereknél fizikailag meg-alapozottabb és általánosabb számítógépes szimulációs módszert használtam, továbbá a diszlokációk és szennyező—vakancia-párok kölcsönhatási energiáját az elméleti úton kapott dilatációs tenzorral — a „tetragonalitás” kiküszöbölésével — számítottam ki.

c) Az irodalomban mindkét járléket tartalmazó, kísérletekkel összevethető számítás nem ismeretes.

8. A feszültségrelaxáció módszerét használva szobahőmérsékleten megmértem az effektív feszültség deformációfüggését Ca, Sr, illetve Ba szennyezött tartalmazó NaCl kristályokban. Megállapítottam, hogy a nulla deformációra extrapolált effektív feszültség (ami a szennyező—vakancia-párok Snoek-járlékának felel meg) a három szennyező közül a Sr esetén a legnagyobb, ami az ionsugarakkal kapcsolatos egyszerű megfontolásokkal nem magyarázható.

Ezt a kísérleti eredményt elméletileg értelmeztem oly módon, hogy a 7.b) pontban említett szimulációs módszerrel a fenti esetekre kiszámítottam a kritikus csúsztatófeszültség Snoek-járlékát szobahőmérsékleten. A számítással kapott eredmények jól egyeznek a kísérleti adatokkal (Tóth és munkatársai 1984b). Megállapítottam, hogy a Sr szennyező anomális hatása azzal függ össze, hogy a szennyező—vakancia-párok diszlokációkat akadályozó hatását a hiba körül létrejött ionelmozdulások határozzák meg, ezek pedig nem egyszerűen az ionmérettől függnék, hanem a szennyező és az alaprács összes kölcsönhatásainak jellegétől. A számított és mért csúsztatófeszültség-értékek egyezése azt mutatja, hogy az általam kiszámított dilatációs tenzorok a szennyező—vakancia-pároknak a diszlokációkkal való kölcsönhatás szempontjából lényeges tulajdonságait magukban foglalják.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Az értekezés a Budapesti Műszaki Egyetem Fizikai Intézetének Kísérleti Fizika Tanszékén készült. Köszönettel tartozom a Tanszék valamennyi dolgozójának, akik munkámat közvetlenül vagy közvetve segítették.

Külön köszönetet mondok azoknak a munkatársaimnak, akikkel egy csoportban dolgoztam, és együttműködésünk több közös közlemény megszületését eredményezte, így dr. Kálmán Péternek, Keszthelyi Tamásnak és dr. Sárközi Józsefnek.

Kísérleti munkám eredményességének alapvető feltétele volt, hogy méréseimet kontrollált szennyezéstartalmú, OH⁻-mentes egykristályokon végezhettem. Ezeket a kristályokat hosszú éveken át Dr. Voszka Rudolf bocsátotta csoportunk rendelkezésére, amiért e helyen is köszönetet mondok.

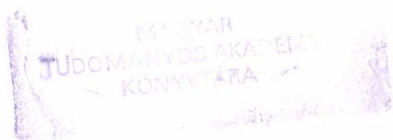
Köszönet illeti dr. Zsigovics Istvánt, a BME Építőanyagok Tanszék tudományos munkatársát, aki a feszültségrelaxációs mérések elvégzésében nyújtott segítséget.

A gondos gépelésért Nagyjános Mihálynénak, az ábrák rajzolásáért Gajdos Endrénének, a fotómunkákért pedig dr. Kiss Józsefnek tartozom köszönettel.

IRODALOM

- Alsem, W. H. M., The Mean Free Path of Mobile Dislocations in Ionic Crystals, Thesis, Rijksuniversiteit te Groningen, 1981.
- Alsic, V. I. Galusztasvili, M. V. i Paperno, I. M., *Krisztallografija* 20, 1113, 1975.
- Andrejev, G. A., *Phys. Stat. Sol. (a)* 60, K181, 1980.
- Andrejev, G. A., *Phys. Stat. Sol. (a)* 67, K127, 1981.
- Andrejev, G. A. i Szmironov, B. I., *Fiz. Tverd. Tela* 10, 1963, 1968.
- Appel, F., *Phys. Stat. Sol. (a)* 25, 607, 1974.
- Appel, F., *Phys. Stat. Sol. (a)* 31, 615, 1975.
- Appel, F., *Phys. Stat. Sol. (a)* 61, 477, 1980.
- Barnett, D. M. and Nix, W. D., *Acta Met.* 21, 1157, 1973.
- Barr, L. W. and Lidiard, A. B., Defects in Ionic Crystals, Physical Chemistry — An Advanced Treatise (Ed. by H. Eyring, D. Henderson and W. Jost), Academic Press, New York, 1970.
- Bassani, F. and Fumi, F. G., *Nuovo Cim.* 11, 274, 1954.
- Bassani, F. and Thomson, R., *Phys. Rev.* 102, 1264, 1956.
- De Batist, R., Van Dingenen, E., Martisev, Ju. N., Szilvesztrova, I. M. i Uruszovszkaja, A. A., *Krisztallografija* 12, 1012, 1967.
- Bethge, H., *Phys. Stat. Sol.* 2, 475, 1962.
- Blisztanov, A. A., Gajduczenja, V. F., Tagieva, M. M. i Saszkolszkaja, M. P., *Krisztallografija*, 17, 361, 1972.
- Bojarszkaja, Ju. Sz., Deformirovanie krisztallov pri iszpütanyijah na mikrotverdoszty, Stiinca, Kisinyev, 1972.
- Born, M. and Mayer, J., *Z. Phys.* 75, 1, 1932.
- Boswarva, I. M., *Phys. Rev. B* 1, 1698, 1970.
- Camagni, P. and Manara, A., *J. Phys. Chem. Solids* 26, 449, 1965.
- Conrad, H., *Mater. Sci. Eng.* 6, 265, 1970.
- Cottrell, A. H. and Jaswon, M. A., *Proc. Roy. Soc. A* 199, 104, 1949.
- Dreyfus, R. W., *Phys. Rev.* 121, 1675, 1961.
- Frank, W., *Z. Naturforsch.* 22a, 365, 1967.
- Frank, W., *Phys. Stat. Sol.* 29, 391, 1968.
- Fuller, R. G., Ionic Conductivity, Point Defects in Solids Vol. 1., Chapter 2. (Ed. by J. H. Crawford and L. M. Slifkin), Plenum Press, New York—London, 1972.
- Galusztasvili, M. V., *Fiz. Tverd. Tela* 12, 1263, 1970.
- Gilman, J. J., *Micromechanics of Flow in Solids*, McGraw-Hill, New York, 1969.
- Glyde, H. R., *Rev. Mod. Phys.* 39, 373, 1967.
- McGowan, W. C., Ph. D. Thesis, University of North Carolina at Chapel Hill, 1965 (idézi: Uruszovszkaja 1968).
- Guin, F. and Pratt, P. L., *Phys. Stat. Sol.* 6, 111, 1964.
- Gupta, I. and Li, J. C. M., *Mater. Sci. Eng.* 6, 20, 1970.
- Gyulai, Z. and Hartly, D., *Z. Phys.* 51, 378, 1928.
- Hartmanová, M., *Phys. Stat. Sol. (a)* 7, 303, 1971.
- Haven, H., *Recueil Trav. Chim.* 69, 1471, 1950.
- Hesse, J., *Phys. Stat. Sol.* 9, 209, 1965.
- Hesse, J., *Reinstoffprobleme* Bd. 3., Akademie Verlag, Berlin, 1967.
- Huddart, A. and Whitworth, R. W., *Phil. Mag.* 27, 107, 1973.
- Johnston, W. G. and Gilman, J. J., *J. Appl. Phys.* 30, 129, 1959.
- Kálmán, P., Keszthelyi, T., Tóth, A. and Sárközi, J., *Acta Phys. Hung.* 49, 407, 1980.
- Kálmán, P., Tóth, A., Keszthelyi, T. and Sárközi, J., *Mater. Sci. Eng.* 54, 85, 1982.
- Kiss, J., *Elektricseszkie effektü pri deformirovanie kamennoj szoli*, Kandidátusi értekezés, Moszkva (MGU), 1966.
- Kocks, U. F., Argon, A. S. and Ashby, M. F., *Thermodynamics and Kinetics of Slip*, Progress in Materials Science Vol. 19, Pergamon Press, Oxford—London—New York, 1975.
- Kovács I., *Magy. Fiz. Folyóirat XVIII*, 1, 1970.
- Kovács I. és Zsoldos L., *Diszlokációk és képlekeny alakváltozás*, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965.
- Labusch, R., *Phys. Stat. Sol.* 41, 659, 1970.
- Labusch, R., *Acta Met.* 20, 917, 1972.
- Li, J. C. M., *Can. J. Phys.* 45, 493, 1967.
- Lidiard, A. B., *Ionic Conductivity*, Handbuch der Physik Vol. XX, Springer Verlag, Berlin, 1957.

- Manning, J. R., Diffusion Kinetics for Atoms in Crystals, Van Nostrand, Princeton, 1968.
- Mayer, J. E., J. Chem. Phys. 1, 270, 1933.
- Mendelson, S., J. Appl. Phys. 32, 1999, 1961.
- Mitchell, T. E. and Heuer, A. H., Mater. Sci. Eng. 28, 81, 1977.
- Moelwyn-Hughes, E. A., The Chemical Statics and Kinetics of Solutions, Academic Press, London and New York, 1971.
- Mott, N. F. and Littleton, M. J., Trans. Faraday Soc. 34, 485, 1938.
- Orowan, E., Proc. Phys. Soc. 52, 8, 1940.
- Overton, Jr. W. C. and Swim, R. T., Phys. Rev. 84, 758, 1951.
- Pauling, L., The Nature of the Chemical Bond, Cornell University Press, 1960.
- Rakova, N. K. i Predvogyityelev, A. A., Relaksacionnue javleniya v tverdih telah (pod red. V. C. Posznyikov), Metallurgija, Moszkva, 1968.
- Raksányi, K. and Voszka, R., Kristall und Technik 4, 227, 1969.
- Reitz, J. R. and Gammel, J. L., J. Chem. Phys. 19, 894, 1951.
- Rozsanszkij, V. N., Sztyepanova, V. M., Parvova, E. V. i Predvogyityelev, A. A., Fiz. Tverd. Tela 5, 634, 1963.
- Sárközi, J., Issledovanyie vliyaniya kolichestva i szosztójanyija primeszi na uprocsnyenie i razuprocsnyenie krisztallov NaCl, Kandidátusi értekezés, Moszkva MGU, 1975.
- Sárközi, J. and Tóth, A., Periodica Polytechnica, Mech. Eng. 21, 229, 1977.
- Sárközi, J., Tóth, A. and Szabó, L., Periodica Polytechnica, Mech. Eng. 21, 239, 1977.
- Sárközi, J., Tóth, A., Orbán, K. and Kálmán, P., Acta Phys. Hung. 53, 81, 1982.
- in der Schmitten, W. and Haasen, P., J. Appl. Phys. 32, 1790, 1961.
- Schöck, G., Thermodynamics and Thermal Activation of Dislocations, Dislocations in Solids, Vol. 3. Moving Dislocations (Ed. by F. R. N. Nabarro), North Holland Publ. Co., Amsterdam—New York—Oxford, 1980.
- Seitz, F., Modern Theory of Solids, McGraw Hill, New York, 1940.
- Skrotzki, W., Mater. Sci. Eng. 38, 271, 1979.
- Skrotzki, W. and Haasen, P., J. de Phys. 42, C3, 119, 1981.
- Skrotzki, W., Steinbrech, R. and Haasen, P., Mater. Sci. Eng. 32, 55, 1978.
- Sprackling, M. T., Phil. Mag. 27, 265, 1973.
- Sprackling, M. T., The Plastic Deformation of Simple Ionic Crystals, Academic Press, London—New York—San Francisco, 1976.
- Stoebe, T. G. and Pratt, P. L., Proc. Brit. Ceram. Soc. 9, 181, 1967.
- Tarján, I. and Mátrai, M. (editors), Laboratory Manual on Crystal Growth, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1972.
- Tasnádi P., Magy. Fiz. Folyóirat XXVIII, 51, 1980.
- Tóth, A., Kálmán, P., Keszthelyi, T. and Sárközi, J., Acta Phys. Hung. 53, 75, 1982.
- Tóth, A., Keszthelyi, T., Kálmán, P. and Sárközi, J., Phys. Stat. Sol. (b) 122, 501, 1984a.
- Tóth, A., Keszthelyi, T., Kálmán, P. and Sárközi, J., Mater. Sci. Eng. 64, 223, 1984b.
- Tóth, A., Keszthelyi, T. and Sárközi, J., Acta Phys. Hung. 49, 415, 1980.
- Tóth, A. and Kiss, J. L., Phys. Stat. Sol. (a) 19, K61, 1973.
- Tóth, A. and Sárközi, J., Phys. Stat. Sol. (a) 28, K93, 1975a.
- Tóth, A. and Sárközi, J., Phys. Stat. Sol. (a) 30, K193, 1975b.
- Tóth, A. and Sárközi, J., J. de Phys. 37, C7, 604, 1976.
- Tóth, A. és Sárközi J., Magy. Fiz. Folyóirat 27, 161, 1979.
- Tóth, A., Sárközi, J. and Voszka, R., Periodica Polytechnica, Elec. Eng. 16, 205, 1972.
- Uruszovszkaja, A. A., Uszpehi Fiz. Nauk 96, 39, 1968.
- Voszka, R., Tarján, I., Berkes, L. und Krajsovsky, J., Kristall und Technik 1, 423, 1966.
- Voszka, R., Raksányi, K. and Berkes, L., Kristall und Technik 5, 409, 1970.
- Whitworth, R. W., Phil. Mag. 17, 1207, 1968.
- Whitworth, R. W., Adv. Phys. 24, 203, 1975.
- Whitworth, R. W., J. de Phys. 37, C7, 340, 1976.
- Winkler, H. F. G., Struktur und Eigenschaften der Kristalle, Springer Verlag, Berlin, 1955.
- Yoshinaga, H. and Morozumi, S., Phil. Mag. 23, 1367, 1971.



A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó és Nyomda főigazgatója

Műszaki szerkesztő: Sándor István

A kézirat a nyomdába érkezett: 1986. március 10. — Terjedelem: 6,15 (A/5) lv

86-1231 — Szegedi Nyomda, Szeged — F. v.: Surányi Tibor igazgató

Ára: 40 Ft
Előfizetés kötetenként: 120 Ft

ISSN 0025—0104

Tóth András: Mozgó diszlokációk és ponthibák kölcsönhatása egyszerű ionkristályokban, II. 501

TÁRGYMUTATÓ

a Magyar Fizikai Folyóirat 33. kötetéhez

<i>Torma Tibor</i> : Fotonkeltés a Higgs-bozon bomlásaiban	1
<i>Hudetz Anta és Monos Emil</i> : Az artériafal anizotrop rostszerkezetének nemlineáris modellje ..	63
<i>Groma István</i> : Plazmaszóró berendezésekhez alkalmazható diagnosztikai módszerek	85
<i>Balásházy Imre</i> : Áramló aeroszolk lecsapódásának modell vizsgálata	127
<i>Martinás Katalin</i> : Transzportfolyamatok irreverzibilis termodinamikai elmélete és alkalmazása a szupravezetők vizsgálatában	181
<i>Györgyi Géza</i> : Káosz diszkrét egydimenziós rendszerekben	235
<i>Vancsó Gyula</i> : Poliének és polienil gyökök néhány fizikai tulajdonságának vizsgálata	291
<i>Ungár Tamás</i> : A diszlokáció szerkezet változása felületén centrált köbös egykristályok alakítási keményedése során	353
<i>Honyek Gyula</i> : Egykristályok ciklikus alakváltozása	379
<i>Lendvai János</i> : Alakváltozás többfázisú rendszerekben	393
<i>Kovács István</i> : Polikristályok rugalmas és képlékeny tulajdonságai	409
<i>Rajkovits Zsuzsa</i> : Alakítás összenomással	429
<i>S. Tóth László</i> : Polikristályok nagy alakváltozásai	443
<i>Tasnádi Péter</i> : A kúszás micromechanismusai	463
<i>Bérces György</i> : A Portevin—Le Chatelier effektus	481
<i>Vörös György</i> : Nagysebességi képlékeny alakváltozások	509
<i>Juhász András</i> : Szuperképlékenység	521
<i>Rajkovits Zsuzsa</i> : Deformációs ikresedés felületkoncentrált köbös fémekben	537
<i>Kovács István</i> : Repedésképződés és törés	551
<i>Honyek Gyula</i> : Fáradásos törés	563

KÖNYVISMERTETÉS

<i>Landolt—Börnstein</i> : Magnetic and Other Properties of Oxydes and Related Compounds	101
<i>Landolt—Börnstein</i> : Physics of Non-Tetrahedrally Bonded Elements and Binary Compounds I ..	101
<i>Landolt—Börnstein</i> : Molecular Constants	102
<i>Landolt—Börnstein</i> : Radicals Centered on N, S, P and Other Heteroatoms. Nitroxyls	103
<i>Landolt—Börnstein</i> : Technology of Si, Ge and SiC	104
<i>A. A. Csernov et al.</i> : Modern Crystallography III. Crystal Growth	104
<i>Szabó György</i> : Szuperionos vezetők	105
<i>Yu. I. Shokin</i> : The Method of Differential Approximation	105
<i>I. A. Kunin</i> : Elastic with Microstructure II	106
<i>F. Yonezawa and T. Ninomiya</i> : Topological Disorder in Condensed Matter	107
<i>W. Glöckle</i> : The Quantum Mechanical Few—Body Problem	107
<i>Carl Nordling—Jonny Österman</i> : Physics Handbook	108
<i>Harald Fritzsche</i> : Vom Urknall zum Zerfall	108
<i>J. Wiedmann</i> : Lineare Operatoren in Hilbertraumen	109
<i>S. V. Vonsovsky, Yu. A. Izyumov, E. Z. Kurmajev</i> : Superconductivity in Transition Metals ...	109
<i>V. L. Aksienov, N. M. Plakida (ed.), S. Stamenkovic</i> : Rasszejanie nejtronov szegnetoelektrikami	110
<i>Salikhov, K. M., Molin, Yu. N. (editor), Sagdeev, R. Z. és Buchacsenko, A. L.</i> : Spinpolarizáció és mágneses hatások gyökreakciókban	110
<i>H. Ryssel and H. Glawischnig (eds)</i> : Ionimplantation: Equipment and Techniques	111
<i>C. A. J. Fletcher</i> : Computational Galerkin Methods	112
<i>Olivier Pironneau</i> : Optimal Shape Design for Elliptic Systems	112

<i>Richard J. Goldstein</i> (ed.): Fluid Mechanics Measurements	113
<i>Tuncer Cebeci, Peter Bradshaw</i> : Physical and Computational Aspects of Convective Heat Transfer	114
<i>J. K. Plattens, J. C. Legros</i> : Convesion in Liquides	114
<i>Tuncer Cebeci</i> (ed.): Numerical and Physical Aspects of Aerodynamics Flows	115
<i>Tuncer Cebeci</i> (ed.): Numerical and Physical Aspects of Aerodynamic Flows II	116
<i>J. A. Essers</i> (ed.): Computational Methods for Turbulent, Transonic and Viscous Flows ...	116
<i>Giovanni Gallavotti</i> : The Elements of Mechanics	117
<i>J. Christiansen</i> (ed.): Hiperfine Interactions of Radioactive Nuclei	117
<i>H. Beck, H. J. Güntherodt</i> (szerk.) Glassy Metals II	118
<i>Reiner Behrisch</i> : Sputtering by Particle Bombardement II	120
<i>H. P. Weber, W. Lüthy</i> (ed.): Laser Spectroscopy VI	120
<i>Y. Ohnuki and S. Kamefuchi</i> : Quantum Field Theory and Parastatistics	120
<i>A. Bianconi, L. Tucoccia and S. Stippich</i> (eds): EXAFS and Near Edge Structure Spectroscopy	120
<i>V. E. Zuev and I. E. Naats</i> : Inverse Problems of Lidar Sensing of the Atmosphere	122
<i>M. Kubicek, M. Marek</i> : Computational Methods in Bifuration Theory and Dissipative Structures	123
<i>F. J. Yndurian</i> : Quantum Chromodynamics.....	123
<i>M. Ausloss and R. J. Elliott</i> (eds): Magnetic Phase Transitions	124
<i>V. N. Popov</i> : Functional Integrals in Quantum Field Theory and Statistical Physics	125

NÉVMUTATÓ

a Magyar Fizikai Folyóirat 33. kötetéhez

<i>Balásházy Imre:</i> Áramló aeroszolk lecsapódásának modell vizsgálata	127
<i>Bérczes György:</i> A Portevin—Le Chatelier effektus	481
<i>Groma István:</i> Plazmaszóró berendezésekhez alkalmazható diagnosztikai módszerek	85
<i>Györgyi Géza:</i> Káosz diszkrét egydimenziós rendszerekben	235
<i>Honyek Gyula:</i> Egykristályok ciklikus alakváltozása	379
<i>Honyek Gyula:</i> Fáradásos törés	563
<i>Hudetz Antal és Monos Emil:</i> Az artériafal anizotrop rostszerkezetének nemlineáris modellje ..	63
<i>Juhász András:</i> Szuperképlékenység	521
<i>Kovács István:</i> Polikristályok rugalmas és képlékeny tulajdonságai	409
<i>Kovács István:</i> Repedésképződés és törés	551
<i>Lendvai János:</i> Alakváltozás többfázisú rendszerekben	393
<i>Martinás Katalin:</i> Transzportfolyamatok irreverzibilis termodinamikai elmélete és alkalmazása a szupravezetők vizsgálatában	181
<i>Monos Emil</i> lásd <i>Hudetz Antal</i> nál	63
<i>Rajkovits Zsuzsa:</i> Alakítás összenyomással	429
<i>Tasnádi Péter:</i> A kúszás mikromechanizmusai	463
<i>S. Tóth László:</i> Polikristályok nagy alakváltozásai	443
<i>Torma Tibor:</i> Fotonkeltés a Higgs-bozon bomlásaiban	1
<i>Ungár Tamás:</i> A diszlokáció szerkezet változása felületen centrált köbös egykristályok alakítási keményedése során	353
<i>Vancsó Gyula:</i> Poliének és polienil gyökök néhány fizikai tulajdonságának vizsgálata	291
<i>Vörös György:</i> Nagysebességű képlékeny alakváltozások	509

